



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 12:41 AM UTC

PDB ID : 6ZH2 / pdb_00006zh2
EMDB ID : EMD-11211
Title : Cryo-EM structure of DNA-PKcs (State 1)
Authors : Chaplin, A.K.; Hardwick, S.W.; Chirgadze, D.Y.; Blundell, T.L.
Deposited on : 2020-06-20
Resolution : 3.92 Å(reported)

This is a Full wwPDB EM Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/EMValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev132
MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
EM percentile statistics : 202505.v01 (Using data in the EMDB archive up until May 2025)
MapQ : 1.9.13
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

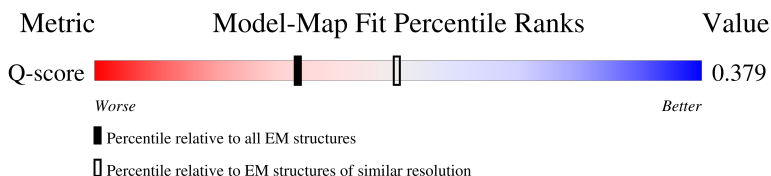
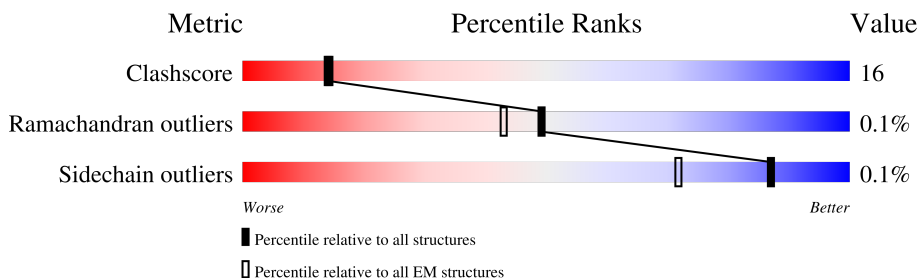
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 3.92 Å.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)	Similar EM resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	229148	23984	-
Ramachandran outliers	224038	23583	-
Sidechain outliers	223484	23102	-
Q-score	-	25397	7862 (3.42 - 4.42)

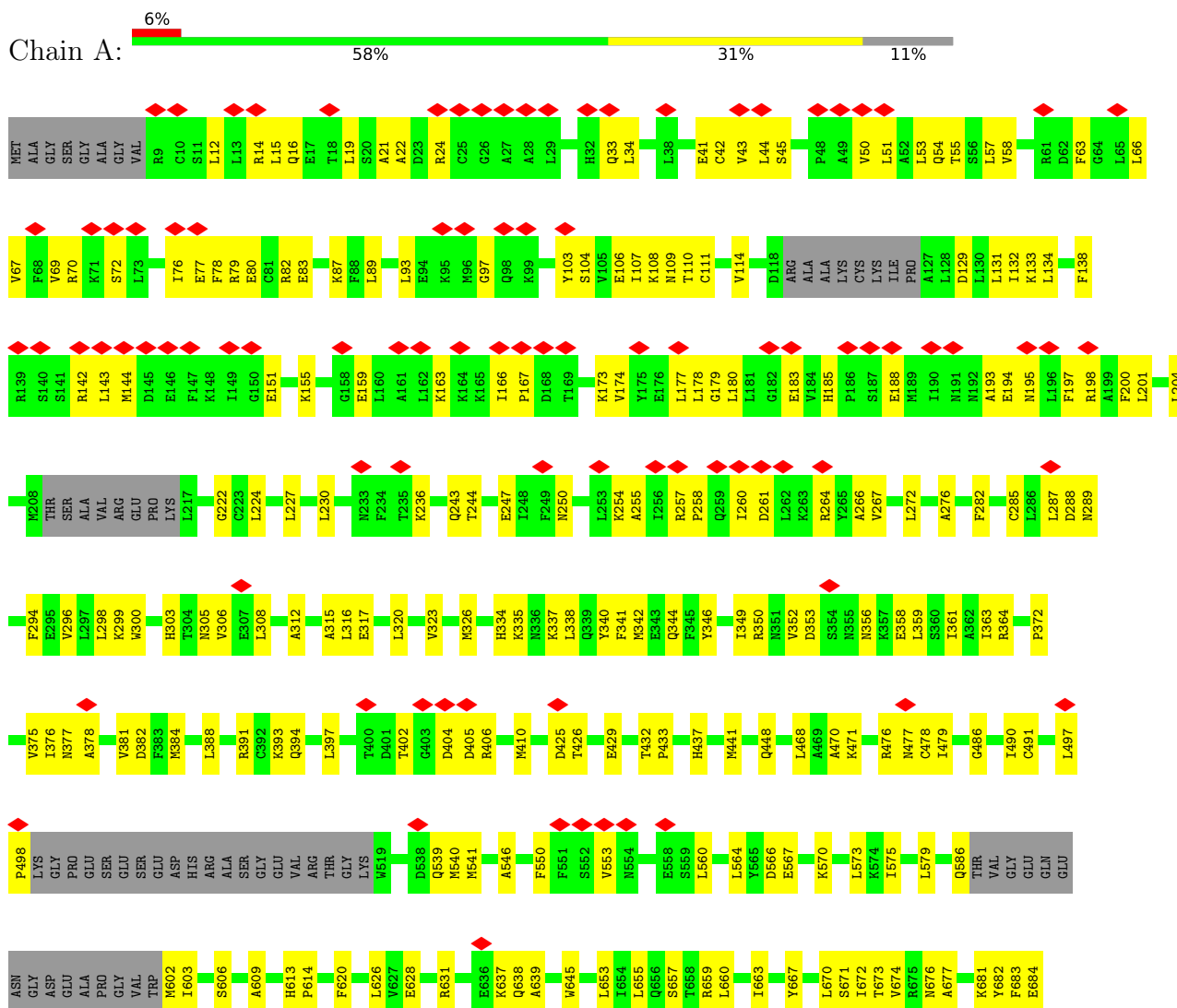
The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the map. The red, orange, yellow and green segments of the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the EM map (all-atom inclusion $< 40\%$). The numeric value is given above the bar.

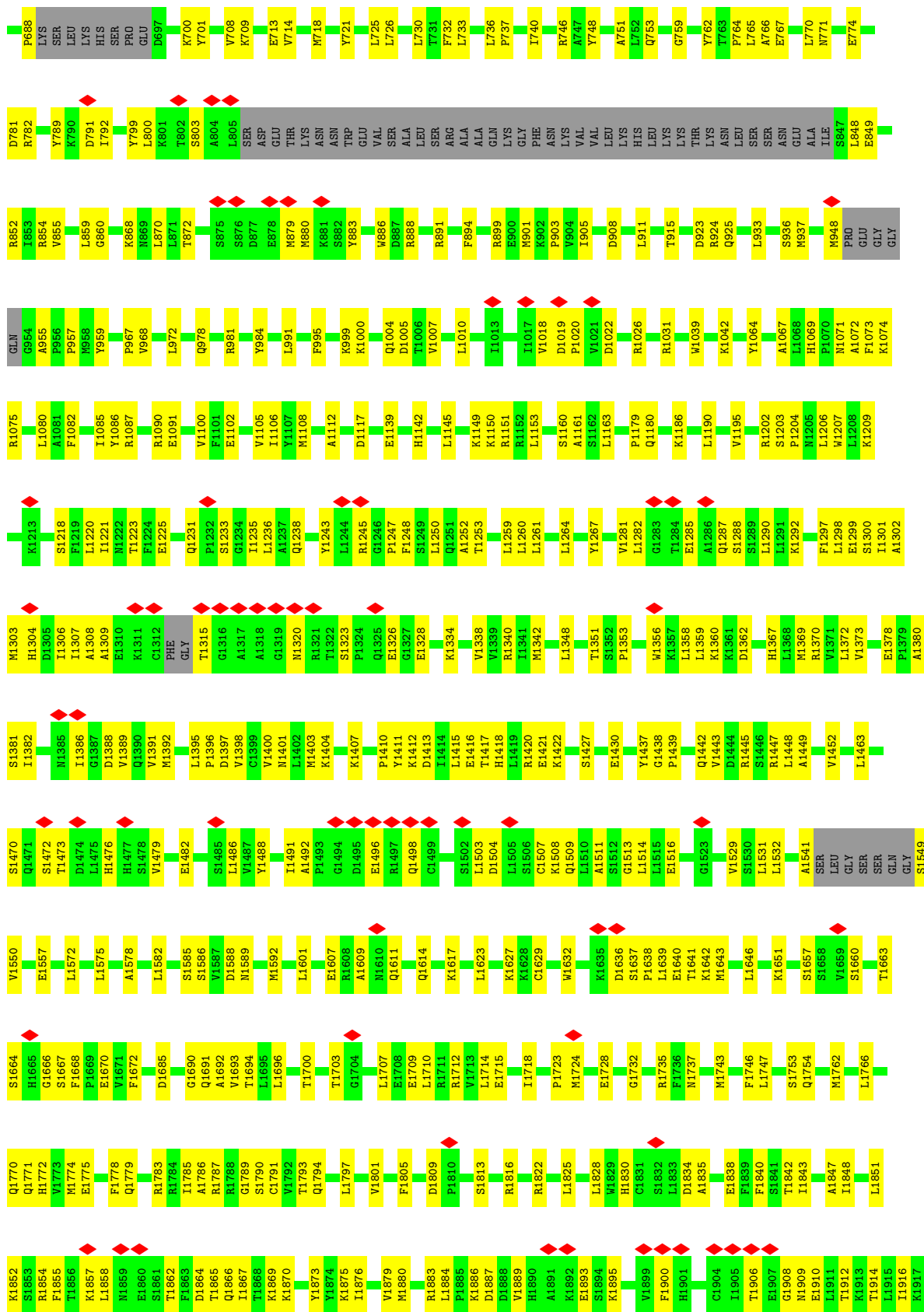
Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	4156	

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and atom inclusion in map density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red diamond above a residue indicates a poor fit to the EM map for this residue (all-atom inclusion < 40%). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

- Molecule 1: DNA-dependent protein kinase catalytic subunit,DNA-dependent protein kinase catalytic subunit,DNA-dependent protein kinase catalytic subunit,DNA-dependent protein kinase catalytic subunit,DNA-dependent protein kinase catalytic subunit,DNA-dependent protein kinase catalytic subunit,DNA-PKcs







E4035	R3889	L3666	P3581	S3488	PRO	N3310	ASP	D3118
K4036	M3890	L3667	E3582	S3489	SER	S3314	ARG	V3119
K4050	A3896	K3668	L3583	W3493	TRP	L3315	MET	L3120
A4054	L3900	M3670	W3588	L3496	GLU	L3316	VAL	L3121
M4055	L3910	K3672	W3589	S3497	CYS	N3319	GLN	R3125
P4056	L3913	M3673	V3592	S3498	GLY	I3320	GLU	L3126
L4059	L3916	D3674	R3593	L3499	P3405	L3321	GLN	A3134
L4064	W3916	K3675	E3594	S3500	A3406	A3322	GLU	L3135
L4065	A3931	S3676	E3595	H3501	V3409	F3323	GLU	T3136
F4074	M3932	P3677	L3596	K3502	T3410	R3324	GLU	E3137
R4075	E3933	P3678	A3597	M3503	E3411	D3325	GLU	I3138
D4076	L3902	M3679	K3598	A3504	A3412	I3328	GLU	E3139
Y4077	L3806	L3680	T3599	D3507	Y3413	I3329	GLU	E3140
G4083	L3807	E3681	V3601	K3508	L3416	T3332	GLU	G3148
S4084	E3807	C3683	N3602	A3511	R3425	T3333	GLU	R3149
K4085	M3808	S3684	K3603	V3512	E3429	Y3334	GLU	N3150
D4086	T3809	P3685	K3604	V3513	N3430	R3335	GLU	V3155
H4087	T3809	M3686	N3605	Q3514	ALA	A3346	GLU	K3158
N4088	T3819	F3694	E3607	I3521	SER	C3347	GLU	L3254
I4089	M3820	L3695	K3608	T3522	VAL	L3348	GLU	A3255
R3959	L3806	E3696	K3609	I3529	ILE	A3349	GLU	W3164
R3965	E3838	M3697	Y3610	V3529	ASP	E3350	GLU	P3169
Q3966	Y3839	E3698	R3612	V3530	SER	E3351	GLU	K3176
A4091	E3839	E3699	K3613	Y3531	ALA	I3351	GLU	W3179
Q4092	Y3845	E3700	N3616	P3532	GLU	D3354	GLU	L3262
E4100	M3846	E3701	A3616	I3535	L3445	K3355	GLU	D3270
Q4103	P3702	L3701	D3619	F3542	K3449	R3356	GLU	I3182
L4107	K3849	P3702	P3620	K3543	M3450	R3357	GLU	I3183
M4108	H3850	Q3704	K3621	T3544	K3455	I3359	GLU	R3186
D4109	D3851	D3705	A3622	T3545	L3456	L3360	GLU	L3190
Q4110	Y3855	G3707	L3625	S3546	N3459	E3361	GLU	S3191
D4113	M3858	R3708	G3626	G3546	R3462	S3363	GLU	K3192
P4114	A3862	G3709	R3629	T3547	L3463	G3364	GLU	L3197
M4115	N3863	K3710	K3636	G3548	K3464	S3365	GLU	THR
I4116	T3865	L3711	F3636	H3549	F3465	S3366	GLU	PRO
R4119	T3866	P3713	G3637	K3550	K3465	S3367	GLU	LEU
W4124	E3866	H3716	K3638	M3553	L3468	E3368	GLU	PRO
W4127	T3867	I3719	E3639	E3553	I3472	E3371	GLU	ASP
X5009	R3874	D3723	H3643	D3563	E3473	R3380	GLU	ASN
X6017	E3875	E3724	K3653	Q3564	R3474	L3385	GLU	SER
X6020	P3879	R3733	M3654	G3565	Y3475	S3386	GLU	ASN
	A3880	Y3733	K3655	I3568	E3478	V3389	GLU	VAL
	D3881	R3737	L3656	F3571	T3479	E3392	GLU	ASP
	L3882	E3747	S3657	L3575	L3480	A3393	GLU	GLN
	F3887	D3757	D3658	L3578	M3483	E3394	GLU	ASP
	Y3888	R3763	F3659	N3580	I3487	E3395	GLU	PRO
			T3663			A3396	GLU	SER
						PRO		

4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, C1	Depositor
Number of particles used	38575	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	53.95	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K3 (6k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.199	Depositor
Minimum map value	-0.071	Depositor
Average map value	0.001	Depositor
Map value standard deviation	0.011	Depositor
Recommended contour level	0.055	Depositor
Map size ($\text{\AA}$)	280.36002, 280.36002, 280.36002	wwPDB
Map dimensions	430, 430, 430	wwPDB
Map angles ($^\circ$)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing ($\text{\AA}$)	0.652, 0.652, 0.652	Depositor

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.15	0/29777	0.37	1/40278 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (1) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1306	ILE	N-CA-C	-5.86	108.14	113.71

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry-related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	29313	0	29356	907	0
All	All	29313	0	29356	907	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 16.

All (907) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3472:ILE:HA	1:A:3479:THR:HG21	1.22	1.15
1:A:3472:ILE:HG23	1:A:3479:THR:HB	1.38	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3472:ILE:HA	1:A:3479:THR:CG2	1.93	0.98
1:A:2085:MET:N	1:A:2184:TYR:HH	1.76	0.84
1:A:3475:TYR:HB3	1:A:3478:GLU:OE2	1.77	0.84
1:A:264:ARG:HH11	1:A:267:VAL:HG23	1.47	0.79
1:A:3612:ARG:HD3	1:A:3799:ARG:HH12	1.47	0.79
1:A:1586:SER:HB2	1:A:1632:TRP:HE1	1.49	0.78
1:A:14:ARG:HE	1:A:2390:HIS:HB3	1.51	0.75
1:A:138:PHE:HA	1:A:142:ARG:HB2	1.68	0.74
1:A:3684:SER:HB2	1:A:3685:PRO:HD3	1.69	0.74
1:A:3319:ASN:HA	1:A:3323:PHE:HB3	1.71	0.72
1:A:3026:ASP:OD1	1:A:3028:ASN:ND2	2.21	0.72
1:A:2477:LEU:HA	1:A:2480:ILE:HG22	1.72	0.72
1:A:76:ILE:O	1:A:79:ARG:HB3	1.89	0.72
1:A:1690:GLY:HA2	1:A:1693:VAL:HG12	1.72	0.72
1:A:3596:LEU:HD23	1:A:3601:VAL:HA	1.70	0.72
1:A:138:PHE:HB3	1:A:180:LEU:HD23	1.71	0.72
1:A:410:MET:HE2	1:A:441:MET:HE1	1.71	0.72
1:A:3680:LEU:HD23	1:A:3682:GLU:H	1.55	0.71
1:A:356:ASN:HD22	1:A:404:ASP:HB3	1.55	0.71
1:A:2383:PHE:O	1:A:2418:LYS:NZ	2.24	0.71
1:A:3472:ILE:CA	1:A:3479:THR:HG21	2.13	0.71
1:A:2158:ARG:HG2	1:A:2196:TRP:HE1	1.55	0.70
1:A:3298:LEU:HD12	1:A:3333:THR:HG23	1.72	0.70
1:A:4085:LYS:O	1:A:4092:GLN:NE2	2.24	0.70
1:A:2595:TRP:O	1:A:2596:ARG:NH2	2.23	0.70
1:A:3392:ALA:HB1	1:A:3409:VAL:HG23	1.72	0.70
1:A:1267:TYR:HD2	1:A:1290:LEU:HD22	1.55	0.70
1:A:3450:MET:HG3	1:A:3468:LEU:HD11	1.73	0.70
1:A:1075:ARG:NH2	1:A:1117:ASP:OD2	2.25	0.70
1:A:3699:LEU:HG	1:A:3719:ILE:HD13	1.74	0.69
1:A:3668:LEU:O	1:A:3672:LYS:NZ	2.26	0.69
1:A:3284:SER:HB3	1:A:3301:LEU:HD22	1.74	0.69
1:A:1775:GLU:OE2	1:A:1822:ARG:NH1	2.27	0.68
1:A:3589:SER:O	1:A:3593:ARG:HB2	1.93	0.68
1:A:166:ILE:HG13	1:A:167:PRO:HD3	1.76	0.67
1:A:1813:SER:OG	1:A:1816:ARG:NH2	2.27	0.67
1:A:3459:ASN:OD1	1:A:3462:ARG:NH2	2.27	0.67
1:A:3425:ARG:NH2	1:A:4003:ASP:OD2	2.27	0.67
1:A:3616:ALA:O	1:A:3629:ARG:NH2	2.27	0.67
1:A:683:PHE:HD2	1:A:737:PRO:HG3	1.60	0.67
1:A:3653:ARG:HH21	1:A:3655:LYS:HD2	1.59	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1087:ARG:HG2	1:A:1090:ARG:HH11	1.59	0.67
1:A:1663:THR:HG22	1:A:1664:SER:H	1.60	0.67
1:A:264:ARG:HH12	1:A:266:ALA:HB3	1.59	0.66
1:A:637:LYS:NZ	1:A:638:GLN:O	2.27	0.66
1:A:1479:VAL:HA	1:A:1482:GLU:HB3	1.76	0.66
1:A:3546:SER:O	1:A:3550:LYS:NZ	2.26	0.66
1:A:3416:LEU:HD21	1:A:3445:LEU:HD21	1.77	0.66
1:A:393:LYS:HG3	1:A:397:LEU:HD12	1.78	0.66
1:A:2183:HIS:CE1	1:A:2185:MET:HB2	2.30	0.66
1:A:3354:ASP:O	1:A:3357:ARG:HB3	1.96	0.66
1:A:3663:THR:HA	1:A:3666:LEU:HD12	1.78	0.66
1:A:3713:PRO:O	1:A:3716:HIS:NE2	2.29	0.65
1:A:1889:VAL:O	1:A:1909:ASN:ND2	2.29	0.65
1:A:721:TYR:HB3	1:A:725:LEU:HB2	1.78	0.65
1:A:2890:ILE:O	1:A:2894:GLU:HG2	1.97	0.65
1:A:255:ALA:HB1	1:A:258:PRO:HB3	1.77	0.65
1:A:50:VAL:O	1:A:53:LEU:HB2	1.96	0.64
1:A:2844:LEU:HB3	1:A:2875:ALA:HB1	1.79	0.64
1:A:402:THR:HG23	1:A:406:ARG:HH11	1.62	0.64
1:A:3027:LEU:HA	1:A:3031:TRP:HZ3	1.63	0.64
1:A:2380:ASN:OD1	1:A:2381:ALA:N	2.30	0.64
1:A:1637:SER:O	1:A:1642:LYS:NZ	2.31	0.64
1:A:1285:GLU:HG2	1:A:1287:GLN:H	1.63	0.63
1:A:3302:LYS:O	1:A:3306:LEU:N	2.29	0.63
1:A:335:LYS:HE2	1:A:376:ILE:HD11	1.81	0.63
1:A:2489:SER:OG	1:A:2490:GLU:OE1	2.17	0.63
1:A:915:THR:HB	1:A:968:VAL:HG11	1.80	0.63
1:A:3058:ASP:OD1	1:A:3059:GLN:N	2.32	0.63
1:A:948:MET:HE2	1:A:955:ALA:H	1.63	0.63
1:A:3095:ASP:OD2	1:A:3098:ARG:NH2	2.32	0.62
1:A:3472:ILE:HG23	1:A:3479:THR:CB	2.23	0.62
1:A:2178:GLY:O	1:A:2183:HIS:NE2	2.32	0.62
1:A:3049:LEU:HD13	1:A:3085:GLU:HB2	1.80	0.62
1:A:3522:THR:HG22	1:A:3529:ILE:HG21	1.81	0.62
1:A:936:SER:OG	1:A:2773:ARG:NH1	2.33	0.62
1:A:1607:GLU:OE2	1:A:1614:GLN:NE2	2.32	0.62
1:A:3702:PRO:HB2	1:A:3794:VAL:HG11	1.82	0.62
1:A:1328:GLU:HB2	1:A:1386:ILE:HD12	1.82	0.62
1:A:93:LEU:O	1:A:97:GLY:N	2.33	0.62
1:A:1880:MET:HE3	1:A:1884:LEU:HD21	1.82	0.62
1:A:3270:ASP:HB3	1:A:3314:SER:HB3	1.82	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1791:CYS:HB2	1:A:1835:ALA:HB2	1.81	0.62
1:A:405:ASP:OD2	1:A:1737:ASN:ND2	2.33	0.62
1:A:2140:LEU:HA	1:A:2143:ARG:HE	1.65	0.62
1:A:2288:TYR:O	1:A:2291:GLN:NE2	2.33	0.62
1:A:3385:LEU:HB3	1:A:3416:LEU:HD13	1.81	0.62
1:A:258:PRO:HB2	1:A:299:LYS:NZ	2.15	0.61
1:A:3292:GLY:HA2	1:A:3348:LEU:HD12	1.81	0.61
1:A:3737:ARG:NH1	1:A:3807:GLU:OE2	2.34	0.61
1:A:1397:ASP:O	1:A:1401:ASN:ND2	2.33	0.61
1:A:2085:MET:HG3	1:A:2088:LEU:HD23	1.82	0.61
1:A:2933:ILE:HD11	1:A:3121:LEU:HD22	1.80	0.61
1:A:3288:SER:O	1:A:3289:ARG:NE	2.33	0.61
1:A:746:ARG:O	1:A:746:ARG:NH1	2.34	0.61
1:A:2384:PHE:O	1:A:2388:LYS:NZ	2.34	0.61
1:A:2123:PRO:HB2	1:A:2125:TRP:CD1	2.36	0.61
1:A:2977:ASN:O	1:A:2979:GLN:NE2	2.33	0.61
1:A:1250:LEU:HD23	1:A:1252:ALA:H	1.66	0.61
1:A:1549:SER:OG	1:A:1550:VAL:N	2.28	0.61
1:A:1640:GLU:OE1	1:A:1640:GLU:N	2.32	0.61
1:A:323:VAL:HG11	1:A:341:PHE:HE2	1.65	0.61
1:A:377:ASN:OD1	1:A:378:ALA:N	2.31	0.61
1:A:1299:GLU:N	1:A:1299:GLU:OE1	2.32	0.61
1:A:1809:ASP:O	1:A:1816:ARG:NH1	2.34	0.61
1:A:2273:GLY:O	1:A:2277:LEU:N	2.28	0.61
1:A:628:GLU:OE1	1:A:631:ARG:NH2	2.33	0.60
1:A:2326:ILE:O	1:A:2330:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:2442:MET:HE1	1:A:2446:LEU:HD22	1.81	0.60
1:A:2255:LEU:O	1:A:2259:LYS:NZ	2.28	0.60
1:A:1771:GLN:H	1:A:1822:ARG:HH12	1.50	0.60
1:A:767:GLU:O	1:A:771:ASN:ND2	2.34	0.60
1:A:2101:VAL:HG21	1:A:2153:THR:HG21	1.84	0.60
1:A:891:ARG:NH2	1:A:957:PRO:O	2.33	0.60
1:A:803:SER:O	1:A:852:ARG:NH1	2.34	0.60
1:A:78:PHE:O	1:A:82:ARG:N	2.29	0.60
1:A:1754:GLN:HA	1:A:1785:ILE:HD11	1.84	0.60
1:A:3118:ASP:OD1	1:A:3119:VAL:N	2.35	0.60
1:A:1150:LYS:NZ	1:A:1161:ALA:O	2.35	0.59
1:A:2940:ARG:HG2	1:A:2957:LEU:HD22	1.83	0.59
1:A:3011:LEU:HD23	1:A:3047:SER:HB3	1.83	0.59
1:A:3774:ILE:HD11	1:A:3997:LEU:HD23	1.83	0.59
1:A:891:ARG:HH12	1:A:957:PRO:HG2	1.67	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3094:ASP:OD1	1:A:3192:LYS:NZ	2.34	0.59
1:A:1007:VAL:HA	1:A:1010:LEU:HD23	1.82	0.59
1:A:381:VAL:HA	1:A:384:MET:HE2	1.84	0.59
1:A:2254:ARG:NH1	1:A:2299:TYR:OH	2.35	0.59
1:A:4083:GLY:HA3	1:A:4090:ARG:HH21	1.67	0.59
1:A:674:VAL:O	1:A:677:ALA:HB3	2.03	0.59
1:A:774:GLU:OE2	1:A:854:ARG:NH2	2.36	0.59
1:A:1151:ARG:HB2	1:A:1163:LEU:HB2	1.84	0.59
1:A:258:PRO:HB2	1:A:299:LYS:HZ3	1.68	0.58
1:A:1696:LEU:HD11	1:A:1710:LEU:HD21	1.85	0.58
1:A:888:ARG:HH21	1:A:3889:ARG:HH21	1.51	0.58
1:A:3501:HIS:O	1:A:3504:ALA:HB3	2.03	0.58
1:A:1139:GLU:O	1:A:1142:HIS:ND1	2.35	0.58
1:A:1243:TYR:HA	1:A:1245:ARG:HH12	1.67	0.58
1:A:3410:ILE:HD11	1:A:3456:LEU:HD13	1.86	0.58
1:A:3500:SER:OG	1:A:3763:ARG:NH2	2.36	0.58
1:A:33:GLN:OE1	1:A:33:GLN:N	2.36	0.58
1:A:77:GLU:O	1:A:80:GLU:HG3	2.04	0.58
1:A:287:LEU:HD23	1:A:337:LYS:HE2	1.85	0.58
1:A:3887:PHE:HA	1:A:3890:MET:HE2	1.84	0.58
1:A:2810:SER:HA	1:A:2861:ILE:HD11	1.86	0.58
1:A:880:MET:HE2	1:A:880:MET:HA	1.86	0.58
1:A:888:ARG:HH12	1:A:3932:MET:HE2	1.68	0.58
1:A:1401:ASN:OD1	1:A:1404:LYS:NZ	2.34	0.58
1:A:2313:LYS:HA	1:A:2316:TYR:HE1	1.66	0.58
1:A:3626:GLY:HA3	1:A:3684:SER:O	2.04	0.58
1:A:2145:PHE:HD1	1:A:2146:LEU:HD22	1.68	0.58
1:A:3228:SER:O	1:A:3232:ARG:NE	2.36	0.58
1:A:2281:MET:HE1	1:A:2287:PRO:HD3	1.85	0.58
1:A:479:ILE:HG22	1:A:567:GLU:HG2	1.86	0.57
1:A:1949:ILE:HG23	1:A:2100:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:3622:ALA:HB3	1:A:3625:LEU:HB2	1.86	0.57
1:A:349:ILE:HD11	1:A:391:ARG:HG3	1.86	0.57
1:A:3229:SER:HA	1:A:3232:ARG:HH21	1.69	0.57
1:A:3328:ILE:HD12	1:A:3412:ALA:HA	1.87	0.57
1:A:1664:SER:HA	1:A:1668:PHE:H	1.69	0.57
1:A:2786:LYS:O	1:A:2789:SER:N	2.37	0.57
1:A:3875:GLU:OE2	1:A:4127:TRP:HA	2.04	0.57
1:A:1448:LEU:HD21	1:A:1514:LEU:HD21	1.87	0.57
1:A:2123:PRO:HD2	1:A:2126:MET:HE2	1.86	0.57
1:A:3365:SER:HA	1:A:3380:ARG:HH11	1.70	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3464:LYS:NZ	1:A:4000:ASN:OD1	2.38	0.57
1:A:41:GLU:HA	1:A:44:LEU:HB3	1.86	0.57
1:A:849:GLU:OE2	1:A:3108:GLN:NE2	2.32	0.57
1:A:2246:LYS:HG3	1:A:2285:LEU:HD21	1.87	0.57
1:A:2519:LEU:O	1:A:2523:ASN:ND2	2.38	0.57
1:A:688:PRO:HB2	1:A:701:TYR:HE2	1.70	0.56
1:A:868:LYS:HD2	1:A:3126:LEU:HD11	1.87	0.56
1:A:1930:GLU:HG2	1:A:1932:GLN:HG2	1.86	0.56
1:A:1936:ARG:HD3	1:A:1939:LEU:HD12	1.87	0.56
1:A:3597:ALA:HA	1:A:3656:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:631:ARG:HG3	1:A:672:ILE:HG21	1.87	0.56
1:A:1039:TRP:HA	1:A:1042:LYS:HG2	1.87	0.56
1:A:1248:PHE:HZ	1:A:1308:ALA:H	1.52	0.56
1:A:1297:PHE:HD2	1:A:1298:LEU:HD12	1.70	0.56
1:A:2213:ASN:O	1:A:2217:ASN:ND2	2.38	0.56
1:A:3183:ILE:HG13	1:A:3242:MET:HG3	1.87	0.56
1:A:67:VAL:HA	1:A:70:ARG:HB2	1.87	0.56
1:A:346:TYR:HB3	1:A:350:ARG:HH12	1.70	0.56
1:A:1367:HIS:HD2	1:A:1370:ARG:HH11	1.54	0.56
1:A:3332:THR:HA	1:A:3335:ARG:HG2	1.86	0.56
1:A:2254:ARG:HH11	1:A:2293:GLY:HA3	1.70	0.56
1:A:2962:ARG:NH2	1:A:2964:ASP:OD2	2.38	0.56
1:A:3984:MET:HE1	1:A:4108:MET:SD	2.46	0.56
1:A:1267:TYR:CD2	1:A:1290:LEU:HD22	2.38	0.56
1:A:1715:GLU:HA	1:A:1718:ILE:HG12	1.88	0.56
1:A:2529:THR:OG1	1:A:2530:ARG:NH1	2.38	0.56
1:A:2573:PRO:O	1:A:2786:LYS:NZ	2.34	0.56
1:A:3733:ARG:HH22	1:A:4022:LYS:HB2	1.70	0.56
1:A:3849:LYS:HZ3	1:A:3851:ASP:HB2	1.69	0.56
1:A:3866:GLU:OE1	1:A:3866:GLU:N	2.34	0.56
1:A:3858:MET:HE1	1:A:4119:ARG:HB2	1.87	0.56
1:A:1786:ALA:O	1:A:1794:GLN:NE2	2.39	0.56
1:A:1916:ILE:O	1:A:1920:TYR:HB2	2.05	0.56
1:A:2303:LEU:HG	1:A:2323:LEU:HD21	1.88	0.56
1:A:394:GLN:NE2	1:A:1685:ASP:OD2	2.38	0.56
1:A:404:ASP:H	1:A:1732:GLY:HA2	1.71	0.56
1:A:1299:GLU:O	1:A:1304:HIS:ND1	2.38	0.56
1:A:3090:TYR:HA	1:A:3093:GLN:HG2	1.88	0.56
1:A:2332:GLU:OE2	1:A:2333:ARG:NH2	2.39	0.55
1:A:2485:ARG:NH2	1:A:2529:THR:O	2.33	0.55
1:A:1855:PHE:HB3	1:A:1858:LEU:HD21	1.87	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:12:LEU:HA	1:A:15:LEU:HB3	1.88	0.55
1:A:42:CYS:SG	1:A:43:VAL:N	2.79	0.55
1:A:3243:ILE:HD11	1:A:3255:ALA:HA	1.88	0.55
1:A:109:ASN:OD1	1:A:110:THR:N	2.39	0.55
1:A:317:GLU:OE1	1:A:364:ARG:NH1	2.39	0.55
1:A:358:GLU:HA	1:A:361:ILE:HD12	1.89	0.55
1:A:1072:ALA:HA	1:A:1075:ARG:HH21	1.70	0.55
1:A:1356:TRP:HA	1:A:1359:LEU:HD13	1.88	0.55
1:A:2919:ASP:OD1	1:A:2920:VAL:N	2.39	0.55
1:A:972:LEU:HD13	1:A:984:TYR:HE2	1.72	0.55
1:A:3863:ASN:N	1:A:3866:GLU:OE2	2.30	0.55
1:A:108:LYS:HA	1:A:111:CYS:SG	2.47	0.55
1:A:1646:LEU:HD21	1:A:1692:ALA:HB2	1.88	0.55
1:A:609:ALA:HB1	1:A:2605:MET:HE2	1.88	0.55
1:A:3653:ARG:HH12	1:A:3659:PHE:HA	1.72	0.55
1:A:163:LYS:NZ	1:A:167:PRO:O	2.39	0.54
1:A:799:TYR:O	1:A:852:ARG:NE	2.41	0.54
1:A:1071:ASN:OD1	1:A:1073:PHE:N	2.37	0.54
1:A:2093:CYS:HB2	1:A:2097:LEU:HD23	1.88	0.54
1:A:1439:PRO:O	1:A:1442:GLN:NE2	2.40	0.54
1:A:12:LEU:O	1:A:16:GLN:HG3	2.07	0.54
1:A:108:LYS:NZ	1:A:151:GLU:OE1	2.40	0.54
1:A:1281:VAL:HG23	1:A:1282:LEU:HG	1.88	0.54
1:A:1407:LYS:HE2	1:A:1463:LEU:HG	1.89	0.54
1:A:2207:LYS:HA	1:A:2210:VAL:HB	1.89	0.54
1:A:2426:HIS:O	1:A:2432:GLN:NE2	2.40	0.54
1:A:3243:ILE:HD13	1:A:3258:LEU:HB2	1.89	0.54
1:A:111:CYS:SG	1:A:134:LEU:HD21	2.47	0.54
1:A:2365:ASN:O	1:A:2369:LYS:HG2	2.07	0.54
1:A:3596:LEU:HB3	1:A:3601:VAL:HG22	1.90	0.54
1:A:2821:ASP:N	1:A:2821:ASP:OD1	2.40	0.54
1:A:3603:LYS:HB3	1:A:3606:ILE:HB	1.89	0.54
1:A:708:VAL:HG22	1:A:740:ILE:HG23	1.89	0.54
1:A:3723:ASP:OD1	1:A:3724:GLU:N	2.41	0.54
1:A:305:ASN:OD1	1:A:306:VAL:N	2.41	0.54
1:A:1672:PHE:HE1	1:A:1710:LEU:HD12	1.72	0.54
1:A:1855:PHE:HE1	1:A:1867:ILE:HG22	1.73	0.54
1:A:3820:MET:HE2	1:A:3879:PRO:HG2	1.90	0.54
1:A:179:GLY:HA3	1:A:230:LEU:HD22	1.90	0.53
1:A:294:PHE:HE1	1:A:320:LEU:HD21	1.72	0.53
1:A:1857:LYS:HD2	1:A:1862:THR:HB	1.91	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3483:MET:HE3	1:A:3487:ILE:HD12	1.90	0.53
1:A:1218:SER:O	1:A:1221:ILE:HG22	2.08	0.53
1:A:1391:VAL:HG23	1:A:1392:MET:SD	2.48	0.53
1:A:2834:GLN:O	1:A:2838:GLN:HG2	2.08	0.53
1:A:4064:LEU:HD13	1:A:4077:TYR:HB3	1.88	0.53
1:A:2857:CYS:O	1:A:2861:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:478:CYS:SG	1:A:479:ILE:N	2.82	0.53
1:A:2965:TYR:HB2	1:A:3005:LEU:HD21	1.90	0.53
1:A:3880:ALA:O	1:A:3966:GLN:NE2	2.41	0.53
1:A:1301:ILE:HD12	1:A:1334:LYS:HG3	1.89	0.53
1:A:1840:PHE:CD1	1:A:1880:MET:HG2	2.44	0.53
1:A:3164:TRP:O	1:A:3186:ARG:NH1	2.38	0.53
1:A:1834:ASP:OD1	1:A:1834:ASP:N	2.41	0.53
1:A:1930:GLU:OE1	1:A:1937:ARG:NH2	2.41	0.53
1:A:2227:LYS:HB3	1:A:2230:VAL:HG12	1.91	0.53
1:A:2313:LYS:HA	1:A:2316:TYR:CE1	2.44	0.53
1:A:3169:PRO:HG2	1:A:3179:TRP:CE2	2.44	0.53
1:A:1086:TYR:CD2	1:A:1087:ARG:HG3	2.43	0.53
1:A:1367:HIS:CD2	1:A:1370:ARG:HH11	2.27	0.53
1:A:1509:GLN:OE1	1:A:1509:GLN:N	2.34	0.53
1:A:2435:CYS:O	1:A:2439:ILE:HG12	2.09	0.53
1:A:978:GLN:OE1	1:A:981:ARG:NH1	2.41	0.53
1:A:2312:TYR:HB2	1:A:2315:VAL:HG12	1.90	0.53
1:A:359:LEU:O	1:A:363:ILE:HG12	2.09	0.52
1:A:3066:ASP:O	1:A:3070:HIS:ND1	2.41	0.52
1:A:1609:ALA:O	1:A:1611:GLN:NE2	2.42	0.52
1:A:2439:ILE:HD12	1:A:2454:LEU:HD11	1.90	0.52
1:A:3989:ARG:NH1	1:A:4100:GLU:OE2	2.42	0.52
1:A:3321:LEU:HD13	1:A:3324:ARG:HH11	1.74	0.52
1:A:51:LEU:O	1:A:54:GLN:HB2	2.09	0.52
1:A:1657:SER:O	1:A:1660:SER:OG	2.27	0.52
1:A:1893:GLU:OE2	1:A:1895:LYS:NZ	2.42	0.52
1:A:3575:LEU:HD13	1:A:3802:LEU:HD21	1.92	0.52
1:A:3747:GLU:N	1:A:3747:GLU:OE1	2.42	0.52
1:A:789:TYR:HA	1:A:792:ILE:HG12	1.91	0.52
1:A:1629:CYS:HG	1:A:1632:TRP:CD1	2.27	0.52
1:A:2540:LEU:HD21	1:A:2832:ILE:HG23	1.91	0.52
1:A:3243:ILE:HG12	1:A:3259:LEU:HD13	1.91	0.52
1:A:155:LYS:NZ	1:A:159:GLU:HB2	2.24	0.52
1:A:1805:PHE:HD1	1:A:1816:ARG:HG2	1.73	0.52
1:A:546:ALA:HA	1:A:550:PHE:HE1	1.75	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1019:ASP:N	1:A:1020:PRO:HD2	2.25	0.52
1:A:1398:VAL:HA	1:A:1401:ASN:HD22	1.75	0.52
1:A:3285:HIS:NE2	1:A:3333:THR:OG1	2.38	0.52
1:A:539:GLN:N	1:A:539:GLN:OE1	2.43	0.52
1:A:2543:ASN:HB3	1:A:2843:PHE:HZ	1.75	0.52
1:A:287:LEU:HD11	1:A:326:MET:HE1	1.92	0.52
1:A:1353:PRO:HB2	1:A:1356:TRP:HB2	1.91	0.52
1:A:2394:LYS:HB3	1:A:2431:ARG:HH21	1.75	0.52
1:A:2494:ASP:OD1	1:A:2495:SER:N	2.43	0.52
1:A:3612:ARG:HD3	1:A:3799:ARG:NH1	2.21	0.52
1:A:3681:LYS:HE2	1:A:3681:LYS:HA	1.92	0.52
1:A:131:LEU:HD11	1:A:173:LYS:HB3	1.92	0.52
1:A:1703:THR:HA	1:A:1707:LEU:HD22	1.92	0.52
1:A:2245:TRP:HB3	1:A:2249:LEU:HD23	1.91	0.52
1:A:3582:GLU:OE2	1:A:3582:GLU:N	2.33	0.52
1:A:948:MET:HG2	1:A:955:ALA:N	2.26	0.51
1:A:1397:ASP:OD1	1:A:1398:VAL:N	2.43	0.51
1:A:1443:VAL:HB	1:A:1447:ARG:HH22	1.75	0.51
1:A:1105:VAL:HA	1:A:1108:MET:HE2	1.92	0.51
1:A:1504:ASP:OD1	1:A:1507:CYS:N	2.39	0.51
1:A:1623:LEU:HB3	1:A:1666:GLY:HA3	1.93	0.51
1:A:1709:GLU:O	1:A:1712:ARG:HG2	2.09	0.51
1:A:2820:MET:HE1	1:A:2829:LYS:HA	1.92	0.51
1:A:1945:TYR:O	1:A:1949:ILE:HG12	2.09	0.51
1:A:14:ARG:NE	1:A:2390:HIS:HB3	2.22	0.51
1:A:653:LEU:O	1:A:657:SER:N	2.36	0.51
1:A:891:ARG:N	1:A:908:ASP:OD2	2.42	0.51
1:A:1153:LEU:HD21	1:A:1160:SER:HA	1.91	0.51
1:A:1529:VAL:HG21	1:A:1582:LEU:HD22	1.92	0.51
1:A:2139:PRO:HD2	1:A:2142:ILE:HD12	1.91	0.51
1:A:2594:ASP:OD1	1:A:2594:ASP:N	2.43	0.51
1:A:560:LEU:HG	1:A:564:LEU:HD23	1.91	0.51
1:A:1248:PHE:HZ	1:A:1307:ILE:HA	1.76	0.51
1:A:1575:LEU:HD11	1:A:1617:LYS:HG2	1.92	0.51
1:A:1828:LEU:O	1:A:1883:ARG:NH2	2.44	0.51
1:A:2149:LEU:O	1:A:2153:THR:HG22	2.10	0.51
1:A:2184:TYR:HA	1:A:2187:VAL:HB	1.93	0.51
1:A:3879:PRO:O	1:A:3965:ARG:NH2	2.44	0.51
1:A:41:GLU:O	1:A:45:SER:OG	2.22	0.51
1:A:197:PHE:CD1	1:A:227:LEU:HD21	2.45	0.51
1:A:1338:VAL:O	1:A:1342:MET:HG2	2.11	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2493:ASN:H	1:A:2496:GLN:HE22	1.57	0.51
1:A:2839:ASP:OD1	1:A:2842:ARG:NH2	2.40	0.51
1:A:3478:GLU:CD	1:A:3478:GLU:H	2.19	0.51
1:A:288:ASP:OD1	1:A:289:ASN:N	2.43	0.51
1:A:376:ILE:HG23	1:A:377:ASN:H	1.76	0.51
1:A:959:TYR:H	1:A:1004:GLN:HE22	1.57	0.51
1:A:1005:ASP:O	1:A:1007:VAL:N	2.39	0.51
1:A:1747:LEU:HD21	1:A:1778:PHE:CE1	2.46	0.51
1:A:1754:GLN:HE22	1:A:1789:GLY:HA3	1.75	0.51
1:A:2175:GLU:N	1:A:2175:GLU:OE1	2.44	0.51
1:A:2283:ASN:HB3	1:A:2285:LEU:HD23	1.92	0.51
1:A:2379:MET:HA	1:A:2382:VAL:HG12	1.92	0.51
1:A:2474:TYR:O	1:A:2478:MET:HG2	2.10	0.51
1:A:3544:ASP:OD1	1:A:3547:THR:N	2.33	0.51
1:A:3553:GLU:OE1	1:A:3553:GLU:N	2.42	0.51
1:A:800:LEU:HA	1:A:852:ARG:HH21	1.76	0.51
1:A:879:MET:O	1:A:3933:GLU:HB2	2.10	0.51
1:A:1413:ASP:O	1:A:1417:THR:HG23	2.11	0.51
1:A:1843:ILE:HG22	1:A:1847:ALA:HB2	1.92	0.51
1:A:2133:LEU:HD21	1:A:2146:LEU:HB3	1.92	0.51
1:A:3134:ALA:O	1:A:3138:ILE:HG12	2.11	0.51
1:A:3957:GLU:OE2	1:A:4124:TRP:NE1	2.44	0.51
1:A:201:LEU:HD23	1:A:204:LEU:HD12	1.93	0.50
1:A:566:ASP:OD1	1:A:645:TRP:NE1	2.40	0.50
1:A:448:GLN:OE1	1:A:448:GLN:N	2.43	0.50
1:A:1482:GLU:O	1:A:1486:LEU:HB2	2.11	0.50
1:A:1866:GLN:HA	1:A:1869:LYS:HE2	1.92	0.50
1:A:3236:PHE:CE2	1:A:3262:LEU:HD21	2.46	0.50
1:A:250:ASN:O	1:A:254:LYS:HB2	2.11	0.50
1:A:1149:LYS:NZ	1:A:1150:LYS:O	2.45	0.50
1:A:1772:HIS:NE2	1:A:1774:MET:HE3	2.26	0.50
1:A:3619:ASP:O	1:A:3621:LYS:N	2.36	0.50
1:A:4050:LYS:HE3	1:A:4059:ILE:HG21	1.91	0.50
1:A:1220:LEU:O	1:A:1223:THR:HG22	2.11	0.50
1:A:2258:GLU:N	1:A:2258:GLU:OE1	2.45	0.50
1:A:3169:PRO:HD3	1:A:3182:ILE:HD11	1.92	0.50
1:A:12:LEU:HD11	1:A:44:LEU:HD22	1.92	0.50
1:A:660:LEU:HB3	1:A:663:ILE:HG12	1.93	0.50
1:A:1638:PRO:HB2	1:A:1641:THR:HG23	1.93	0.50
1:A:1747:LEU:HD13	1:A:1762:MET:HE3	1.94	0.50
1:A:1848:ILE:O	1:A:1852:LYS:N	2.45	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2257:PHE:O	1:A:2261:SER:OG	2.26	0.50
1:A:2349:LEU:O	1:A:2353:GLN:N	2.43	0.50
1:A:2448:PRO:HA	1:A:2451:LEU:HB3	1.93	0.50
1:A:681:LYS:HB3	1:A:684:GLU:HB2	1.94	0.50
1:A:1323:SER:OG	1:A:1326:GLU:OE2	2.29	0.50
1:A:3532:PRO:HA	1:A:3535:ILE:HG22	1.94	0.50
1:A:1367:HIS:CD2	1:A:1370:ARG:HD3	2.47	0.50
1:A:1693:VAL:O	1:A:1696:LEU:HD23	2.12	0.50
1:A:1179:PRO:HB3	1:A:1259:LEU:HD12	1.94	0.50
1:A:1342:MET:HE1	1:A:1372:LEU:HD13	1.94	0.50
1:A:1588:ASP:OD1	1:A:1589:ASN:N	2.44	0.50
1:A:2782:ASP:OD1	1:A:2783:ILE:N	2.45	0.50
1:A:272:LEU:HD21	1:A:312:ALA:HA	1.94	0.49
1:A:372:PRO:HA	1:A:375:VAL:HG22	1.93	0.49
1:A:2126:MET:HE1	1:A:2160:TYR:CD2	2.46	0.49
1:A:2319:ALA:O	1:A:2323:LEU:HD23	2.12	0.49
1:A:3636:PHE:CE2	1:A:3669:LYS:HB3	2.47	0.49
1:A:3778:ASP:OD1	1:A:3781:CYS:N	2.34	0.49
1:A:1935:GLU:OE1	1:A:1935:GLU:N	2.30	0.49
1:A:2092:GLU:H	1:A:2092:GLU:CD	2.18	0.49
1:A:2563:LEU:HD23	1:A:2795:GLN:HB2	1.95	0.49
1:A:3496:ILE:HB	1:A:3707:GLY:HA2	1.94	0.49
1:A:3580:ASN:HB2	1:A:3583:LEU:HD23	1.94	0.49
1:A:377:ASN:CG	1:A:378:ALA:H	2.20	0.49
1:A:2471:GLU:OE2	1:A:2475:ASN:ND2	2.44	0.49
1:A:194:GLU:CD	1:A:194:GLU:H	2.21	0.49
1:A:1195:VAL:HG11	1:A:1204:PRO:HA	1.95	0.49
1:A:1369:MET:HA	1:A:1372:LEU:HB3	1.94	0.49
1:A:1491:ILE:HG13	1:A:1492:ALA:N	2.27	0.49
1:A:1866:GLN:O	1:A:1870:LYS:HG3	2.11	0.49
1:A:3120:LEU:HD13	1:A:3896:ALA:HA	1.93	0.49
1:A:1400:VAL:HA	1:A:1403:MET:HE2	1.94	0.49
1:A:2190:VAL:HA	1:A:2193:ILE:HG22	1.93	0.49
1:A:2538:ARG:NH1	1:A:2561:PHE:O	2.42	0.49
1:A:3065:ILE:O	1:A:3069:MET:N	2.36	0.49
1:A:486:GLY:O	1:A:490:ILE:HG12	2.13	0.49
1:A:352:VAL:HG11	1:A:1735:ARG:HH11	1.78	0.49
1:A:382:ASP:OD1	1:A:382:ASP:N	2.42	0.49
1:A:3058:ASP:OD1	1:A:3060:SER:N	2.37	0.49
1:A:3148:GLN:N	1:A:3148:GLN:OE1	2.46	0.49
1:A:200:PHE:CZ	1:A:224:LEU:HB3	2.48	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:883:TYR:HB3	1:A:3896:ALA:HB2	1.94	0.49
1:A:1064:TYR:CG	1:A:1106:ILE:HD13	2.47	0.49
1:A:3413:TYR:CD1	1:A:3449:LYS:HD3	2.47	0.49
1:A:247:GLU:HB2	1:A:282:PHE:CD1	2.48	0.49
1:A:1351:THR:HG23	1:A:1353:PRO:HD2	1.95	0.49
1:A:1472:SER:OG	1:A:1473:THR:N	2.45	0.49
1:A:2414:GLN:O	1:A:2418:LYS:HG2	2.13	0.49
1:A:4086:ASP:OD1	1:A:4086:ASP:N	2.43	0.49
1:A:2130:HIS:NE2	1:A:2163:HIS:O	2.39	0.49
1:A:4020:MET:HG2	1:A:4027:TRP:CE2	2.48	0.49
1:A:352:VAL:HG11	1:A:1735:ARG:HD2	1.95	0.48
1:A:575:ILE:O	1:A:579:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:2369:LYS:NZ	1:A:2399:GLU:HG2	2.28	0.48
1:A:2577:PHE:O	1:A:2784:GLN:NE2	2.46	0.48
1:A:4090:ARG:NH2	1:A:4113:ASP:OD2	2.42	0.48
1:A:1607:GLU:O	1:A:1611:GLN:HB2	2.13	0.48
1:A:3592:VAL:HA	1:A:3595:GLU:HG2	1.95	0.48
1:A:1221:ILE:HD11	1:A:1288:SER:HA	1.95	0.48
1:A:1373:VAL:HG21	1:A:1418:HIS:HB3	1.94	0.48
1:A:1775:GLU:O	1:A:1779:GLN:HG2	2.12	0.48
1:A:3653:ARG:HD2	1:A:3655:LYS:HD2	1.94	0.48
1:A:709:LYS:O	1:A:713:GLU:HG2	2.12	0.48
1:A:3681:LYS:HB3	1:A:3724:GLU:HA	1.96	0.48
1:A:106:GLU:HA	1:A:109:ASN:ND2	2.28	0.48
1:A:1601:LEU:HD13	1:A:1651:LYS:HB3	1.94	0.48
1:A:859:LEU:HD11	1:A:870:LEU:HD22	1.96	0.48
1:A:2330:VAL:HG11	1:A:2338:GLU:HB3	1.94	0.48
1:A:1112:ALA:HB1	1:A:1180:GLN:HG2	1.95	0.48
1:A:1488:TYR:CD1	1:A:1531:LEU:HD21	2.49	0.48
1:A:1854:ARG:HE	1:A:1855:PHE:H	1.61	0.48
1:A:1865:THR:OG1	1:A:1866:GLN:OE1	2.31	0.48
1:A:1909:ASN:OD1	1:A:1910:GLU:N	2.47	0.48
1:A:2258:GLU:OE2	1:A:2259:LYS:NZ	2.41	0.48
1:A:3953:LEU:HD22	1:A:4026:SER:HB3	1.96	0.48
1:A:429:GLU:OE1	1:A:429:GLU:N	2.42	0.48
1:A:672:ILE:HG13	1:A:673:THR:N	2.28	0.48
1:A:1416:GLU:HB3	1:A:1420:ARG:HH22	1.79	0.48
1:A:1629:CYS:HG	1:A:1632:TRP:CG	2.32	0.48
1:A:67:VAL:HB	1:A:82:ARG:HH22	1.78	0.48
1:A:3066:ASP:HA	1:A:3069:MET:HB2	1.95	0.48
1:A:3868:VAL:HG23	1:A:4114:PRO:HB2	1.96	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1348:LEU:O	1:A:1351:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:1503:LEU:HD22	1:A:1508:LYS:HB2	1.96	0.48
1:A:1825:LEU:HD22	1:A:1879:VAL:HG11	1.96	0.48
1:A:3085:GLU:OE1	1:A:3085:GLU:N	2.40	0.48
1:A:3611:GLU:OE1	1:A:3611:GLU:N	2.45	0.48
1:A:358:GLU:N	1:A:358:GLU:OE1	2.46	0.47
1:A:602:MET:HE2	1:A:602:MET:HA	1.96	0.47
1:A:1712:ARG:HA	1:A:1715:GLU:HG2	1.96	0.47
1:A:437:HIS:NE2	1:A:6017:UNK:O	2.46	0.47
1:A:603:ILE:HD11	1:A:1031:ARG:HG2	1.96	0.47
1:A:1427:SER:HA	1:A:1430:GLU:OE2	2.14	0.47
1:A:1772:HIS:HB3	1:A:1775:GLU:HG3	1.96	0.47
1:A:1790:SER:O	1:A:1794:GLN:HG3	2.14	0.47
1:A:2172:ALA:HB1	1:A:2215:LEU:HD12	1.95	0.47
1:A:104:SER:HA	1:A:107:ILE:HD12	1.96	0.47
1:A:1728:GLU:OE1	1:A:1728:GLU:N	2.30	0.47
1:A:1854:ARG:HE	1:A:1855:PHE:N	2.12	0.47
1:A:1906:THR:OG1	1:A:1908:GLY:O	2.30	0.47
1:A:200:PHE:O	1:A:204:LEU:HG	2.15	0.47
1:A:541:MET:HE2	1:A:541:MET:HA	1.97	0.47
1:A:1445:ARG:H	1:A:1445:ARG:HD2	1.80	0.47
1:A:1636:ASP:OD1	1:A:1636:ASP:N	2.46	0.47
1:A:2890:ILE:HD11	1:A:2929:LEU:HB3	1.95	0.47
1:A:3786:LEU:HB3	1:A:3910:LEU:HD22	1.95	0.47
1:A:69:VAL:O	1:A:72:SER:OG	2.28	0.47
1:A:432:THR:OG1	1:A:433:PRO:HD3	2.14	0.47
1:A:476:ARG:CZ	1:A:477:ASN:HA	2.44	0.47
1:A:2269:ASP:OD1	1:A:2270:ASN:N	2.47	0.47
1:A:2420:PHE:O	1:A:2423:VAL:HG22	2.14	0.47
1:A:2424:MET:HB3	1:A:2435:CYS:SG	2.54	0.47
1:A:3176:MET:HG3	1:A:3254:LEU:HD23	1.96	0.47
1:A:3190:LEU:HD13	1:A:3235:LYS:HZ3	1.79	0.47
1:A:50:VAL:HA	1:A:53:LEU:HD23	1.96	0.47
1:A:89:LEU:HD11	1:A:133:LYS:HD3	1.96	0.47
1:A:129:ASP:O	1:A:133:LYS:HE3	2.14	0.47
1:A:222:GLY:HA2	1:A:267:VAL:HG13	1.96	0.47
1:A:1578:ALA:O	1:A:1582:LEU:HD23	2.15	0.47
1:A:1873:TYR:HA	1:A:1876:ILE:HD12	1.96	0.47
1:A:2828:GLU:O	1:A:2832:ILE:HG12	2.15	0.47
1:A:1513:GLY:O	1:A:1516:GLU:HG2	2.15	0.47
1:A:1880:MET:O	1:A:1884:LEU:HD13	2.14	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1900:PHE:HZ	1:A:1906:THR:HA	1.78	0.47
1:A:1909:ASN:ND2	1:A:1912:THR:HG23	2.29	0.47
1:A:1951:VAL:O	1:A:1955:VAL:HG12	2.15	0.47
1:A:3303:THR:HA	1:A:3306:LEU:HB3	1.96	0.47
1:A:3357:ARG:O	1:A:3360:LEU:HB3	2.14	0.47
1:A:3531:TYR:HB2	1:A:3532:PRO:HD3	1.97	0.47
1:A:3667:LEU:HA	1:A:3670:MET:SD	2.55	0.47
1:A:4027:TRP:HE3	1:A:4030:GLU:HB3	1.79	0.47
1:A:1202:ARG:HE	1:A:1207:TRP:HA	1.80	0.47
1:A:1949:ILE:HD12	1:A:2100:LEU:HD13	1.96	0.47
1:A:2219:LEU:O	1:A:2223:VAL:HG23	2.15	0.47
1:A:2455:LEU:HD12	1:A:2458:VAL:HB	1.97	0.47
1:A:3588:TRP:CD1	1:A:3613:MET:HG2	2.50	0.47
1:A:3685:PRO:HG2	1:A:3687:MET:HB3	1.96	0.47
1:A:174:VAL:O	1:A:177:LEU:HG	2.14	0.47
1:A:1018:VAL:HG13	1:A:1018:VAL:O	2.15	0.47
1:A:1304:HIS:HB3	1:A:1307:ILE:O	2.15	0.47
1:A:1378:GLU:OE1	1:A:1381:SER:HB3	2.14	0.47
1:A:2168:LEU:HB3	1:A:2189:ILE:HD11	1.95	0.47
1:A:3698:GLU:OE1	1:A:3698:GLU:N	2.40	0.47
1:A:3757:ASP:N	1:A:3757:ASP:OD1	2.48	0.47
1:A:3944:HIS:NE2	1:A:4020:MET:HE1	2.30	0.47
1:A:2397:CYS:O	1:A:2401:VAL:HG23	2.14	0.46
1:A:4035:GLU:HG3	1:A:4036:LYS:HZ2	1.80	0.46
1:A:1069:HIS:CD2	1:A:1074:LYS:HD2	2.50	0.46
1:A:2339:GLU:H	1:A:2339:GLU:CD	2.22	0.46
1:A:2443:MET:HE2	1:A:2443:MET:HB3	1.82	0.46
1:A:2472:GLN:O	1:A:2476:ILE:HG12	2.14	0.46
1:A:901:MET:HG2	1:A:903:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:1019:ASP:OD1	1:A:1026:ARG:NH1	2.49	0.46
1:A:3653:ARG:HG3	1:A:3659:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:655:LEU:HG	1:A:1389:VAL:HG12	1.98	0.46
1:A:2886:GLN:O	1:A:2890:ILE:HG12	2.16	0.46
1:A:3066:ASP:OD1	1:A:3067:LYS:N	2.49	0.46
1:A:3578:LEU:HD21	1:A:3681:LYS:HZ1	1.80	0.46
1:A:3864:ARG:NH1	1:A:4084:SER:HB2	2.30	0.46
1:A:905:ILE:HG13	1:A:2811:SER:HB3	1.97	0.46
1:A:1783:ARG:HG2	1:A:1830:HIS:CE1	2.51	0.46
1:A:2369:LYS:HE2	1:A:2369:LYS:HA	1.97	0.46
1:A:2424:MET:O	1:A:2432:GLN:NE2	2.48	0.46
1:A:3497:SER:HB3	1:A:3707:GLY:HA3	1.98	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:470:ALA:C	1:A:471:LYS:HD2	2.40	0.46
1:A:606:SER:HB2	1:A:1080:LEU:HD22	1.97	0.46
1:A:1700:THR:HG21	1:A:1753:SER:OG	2.15	0.46
1:A:1864:ASP:O	1:A:1867:ILE:HG12	2.16	0.46
1:A:2104:MET:HA	1:A:2107:SER:HB3	1.98	0.46
1:A:2197:THR:HG21	1:A:2244:CYS:HB3	1.98	0.46
1:A:4074:PHE:HD2	1:A:4075:ARG:HD2	1.80	0.46
1:A:923:ASP:C	1:A:925:GLN:H	2.22	0.46
1:A:1723:PRO:O	1:A:1724:MET:HE2	2.16	0.46
1:A:15:LEU:O	1:A:19:LEU:HG	2.15	0.46
1:A:1100:VAL:HG11	1:A:1145:LEU:HD21	1.97	0.46
1:A:2542:LEU:HD21	1:A:2558:ALA:HB1	1.98	0.46
1:A:3607:GLU:N	1:A:3607:GLU:OE1	2.49	0.46
1:A:276:ALA:HA	1:A:315:ALA:HA	1.97	0.46
1:A:1639:LEU:O	1:A:1643:MET:HG3	2.16	0.46
1:A:2575:PRO:O	1:A:2577:PHE:N	2.49	0.46
1:A:3027:LEU:HA	1:A:3031:TRP:CZ3	2.46	0.46
1:A:886:TRP:CZ3	1:A:911:LEU:HB3	2.51	0.45
1:A:1225:GLU:HB2	1:A:1235:ILE:HG12	1.98	0.45
1:A:2274:ILE:HG23	1:A:2322:VAL:HG11	1.98	0.45
1:A:3097:ASP:OD1	1:A:3098:ARG:N	2.44	0.45
1:A:3321:LEU:HA	1:A:3324:ARG:HH11	1.81	0.45
1:A:3855:TYR:HA	1:A:3858:MET:HB3	1.99	0.45
1:A:356:ASN:O	1:A:359:LEU:HB3	2.15	0.45
1:A:991:LEU:HD22	1:A:995:PHE:HE2	1.81	0.45
1:A:1186:LYS:O	1:A:1190:LEU:HD23	2.16	0.45
1:A:1437:TYR:HE2	1:A:1511:ALA:HB2	1.81	0.45
1:A:2462:VAL:N	1:A:2473:MET:HE1	2.31	0.45
1:A:3006:ALA:HB3	1:A:3257:LYS:HD3	1.98	0.45
1:A:3356:ALA:O	1:A:3359:ILE:HG22	2.16	0.45
1:A:303:HIS:CE1	1:A:305:ASN:HB2	2.52	0.45
1:A:933:LEU:HD11	1:A:937:MET:HE3	1.98	0.45
1:A:1934:LEU:O	1:A:1938:ARG:N	2.41	0.45
1:A:2893:LEU:HD23	1:A:2893:LEU:HA	1.83	0.45
1:A:201:LEU:HA	1:A:204:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:573:LEU:HD23	1:A:573:LEU:HA	1.83	0.45
1:A:1496:GLU:HG3	1:A:1498:GLN:OE1	2.17	0.45
1:A:3371:GLU:OE1	1:A:3371:GLU:N	2.32	0.45
1:A:3496:ILE:HD11	1:A:3521:ILE:HD11	1.98	0.45
1:A:55:THR:O	1:A:58:VAL:HG22	2.15	0.45
1:A:236:LYS:HG3	1:A:243:GLN:HG3	1.98	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1067:ALA:O	1:A:1075:ARG:HG2	2.16	0.45
1:A:1470:SER:HB2	1:A:1476:HIS:CG	2.51	0.45
1:A:1709:GLU:OE1	1:A:1709:GLU:N	2.44	0.45
1:A:1864:ASP:HA	1:A:1867:ILE:HG12	1.98	0.45
1:A:3992:ARG:NH1	1:A:4103:GLN:OE1	2.49	0.45
1:A:967:PRO:HG3	1:A:1010:LEU:HD12	1.97	0.45
1:A:1303:MET:N	1:A:1303:MET:SD	2.90	0.45
1:A:1449:ALA:HA	1:A:1452:VAL:HG12	1.99	0.45
1:A:2319:ALA:HA	1:A:2322:VAL:HG12	1.98	0.45
1:A:3512:VAL:HA	1:A:3515:GLN:OE1	2.16	0.45
1:A:1412:LYS:O	1:A:1415:LEU:HB3	2.17	0.45
1:A:1438:GLY:N	1:A:1445:ARG:HH12	2.15	0.45
1:A:1825:LEU:HD11	1:A:1875:LYS:HD3	1.98	0.45
1:A:1887:ASP:N	1:A:1887:ASP:OD1	2.48	0.45
1:A:3393:GLU:OE1	1:A:3393:GLU:N	2.45	0.45
1:A:3806:LEU:O	1:A:3809:THR:OG1	2.31	0.45
1:A:174:VAL:HG23	1:A:177:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:1082:PHE:HA	1:A:1085:ILE:HG12	1.99	0.45
1:A:2540:LEU:HG	1:A:2832:ILE:HD12	1.97	0.45
1:A:3008:TRP:CH2	1:A:3050:LYS:HG3	2.51	0.45
1:A:3027:LEU:HD11	1:A:3060:SER:HB2	1.99	0.45
1:A:3462:ARG:NH2	1:A:3708:ARG:HG2	2.32	0.45
1:A:3496:ILE:HA	1:A:3499:ILE:HG12	1.99	0.45
1:A:860:GLY:HA3	1:A:3136:THR:OG1	2.17	0.45
1:A:1438:GLY:H	1:A:1445:ARG:HH12	1.65	0.45
1:A:1714:LEU:O	1:A:1718:ILE:HG23	2.16	0.45
1:A:2340:SER:O	1:A:2344:LEU:HD23	2.17	0.45
1:A:3701:ILE:O	1:A:3704:GLN:HG2	2.16	0.45
1:A:2376:ASP:OD1	1:A:2377:ARG:N	2.50	0.45
1:A:2438:ILE:O	1:A:2442:MET:HG3	2.17	0.45
1:A:2586:PHE:HB2	1:A:2776:ARG:HH21	1.81	0.45
1:A:2897:LEU:HD23	1:A:2897:LEU:HA	1.83	0.45
1:A:103:TYR:CE2	1:A:107:ILE:HD11	2.53	0.44
1:A:163:LYS:HD2	1:A:163:LYS:HA	1.79	0.44
1:A:1203:SER:H	1:A:1206:LEU:HD12	1.83	0.44
1:A:2813:PHE:HZ	1:A:2836:LEU:HD13	1.82	0.44
1:A:3069:MET:HE3	1:A:3069:MET:HA	1.98	0.44
1:A:3190:LEU:HD13	1:A:3235:LYS:HB2	1.99	0.44
1:A:261:ASP:N	1:A:261:ASP:OD1	2.47	0.44
1:A:306:VAL:C	1:A:308:LEU:H	2.26	0.44
1:A:771:ASN:OD1	1:A:854:ARG:NH2	2.50	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2434:VAL:O	1:A:2438:ILE:HG13	2.17	0.44
1:A:3511:ALA:O	1:A:3514:VAL:HG22	2.16	0.44
1:A:53:LEU:O	1:A:57:LEU:N	2.48	0.44
1:A:296:VAL:O	1:A:299:LYS:HG3	2.18	0.44
1:A:781:ASP:OD1	1:A:782:ARG:N	2.51	0.44
1:A:1381:SER:OG	1:A:1382:ILE:N	2.50	0.44
1:A:1886:LYS:HD2	1:A:1955:VAL:O	2.18	0.44
1:A:3459:ASN:O	1:A:3463:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:3673:ASP:OD1	1:A:3673:ASP:N	2.50	0.44
1:A:3846:MET:HE3	1:A:3862:ALA:HB2	1.98	0.44
1:A:659:ARG:HE	1:A:660:LEU:HD23	1.81	0.44
1:A:682:TYR:CZ	1:A:700:LYS:HG2	2.52	0.44
1:A:1627:LYS:HA	1:A:1627:LYS:HD2	1.69	0.44
1:A:2318:ALA:O	1:A:2321:GLU:HG2	2.17	0.44
1:A:3478:GLU:CD	1:A:3478:GLU:N	2.76	0.44
1:A:363:ILE:HD12	1:A:388:LEU:HD13	1.99	0.44
1:A:1309:ALA:HA	1:A:1315:THR:HG21	1.99	0.44
1:A:1358:LEU:HD11	1:A:1410:PRO:HG2	1.99	0.44
1:A:2898:LEU:HD21	1:A:3973:PRO:HG3	1.99	0.44
1:A:3589:SER:O	1:A:3593:ARG:CB	2.62	0.44
1:A:4113:ASP:HB3	1:A:4116:ILE:HD12	1.99	0.44
1:A:3274:VAL:HA	1:A:3277:VAL:HG12	2.00	0.44
1:A:3295:GLU:O	1:A:3299:THR:HG23	2.17	0.44
1:A:3819:THR:HA	1:A:3889:ARG:NH1	2.33	0.44
1:A:4056:PRO:HG3	1:A:4107:LEU:HD23	1.99	0.44
1:A:683:PHE:CD2	1:A:737:PRO:HG3	2.47	0.44
1:A:848:LEU:O	1:A:852:ARG:HG3	2.18	0.44
1:A:1367:HIS:HD2	1:A:1370:ARG:HD3	1.82	0.44
1:A:2424:MET:HE1	1:A:2458:VAL:HG22	2.00	0.44
1:A:3065:ILE:HD12	1:A:3078:LEU:HD21	1.99	0.44
1:A:3072:GLU:C	1:A:3074:GLN:H	2.24	0.44
1:A:3875:GLU:HB3	1:A:3965:ARG:HD3	1.99	0.44
1:A:4115:ASN:O	1:A:4119:ARG:HG2	2.18	0.44
1:A:639:ALA:HB2	1:A:676:ASN:HB2	2.00	0.44
1:A:1090:ARG:NH2	1:A:1091:GLU:OE2	2.51	0.44
1:A:1102:GLU:HG2	1:A:1106:ILE:HD12	2.00	0.44
1:A:1770:GLN:HA	1:A:1822:ARG:HH22	1.83	0.44
1:A:2123:PRO:HB2	1:A:2125:TRP:HD1	1.83	0.44
1:A:2511:ILE:HD13	1:A:2550:ILE:HG22	1.99	0.44
1:A:2589:TYR:HB2	1:A:2777:HIS:ND1	2.33	0.44
1:A:2592:ASP:OD1	1:A:2593:SER:N	2.51	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3347:CYS:HA	1:A:3350:GLU:HB2	2.00	0.44
1:A:614:PRO:HB3	1:A:620:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:1421:GLU:OE2	1:A:1422:LYS:HG2	2.17	0.43
1:A:1693:VAL:HG21	1:A:1746:PHE:CE1	2.53	0.43
1:A:2140:LEU:HB3	1:A:2143:ARG:HH21	1.83	0.43
1:A:2589:TYR:HB3	1:A:2775:TYR:O	2.17	0.43
1:A:3065:ILE:HG22	1:A:3069:MET:HG2	2.00	0.43
1:A:3366:SER:OG	1:A:3368:GLU:OE2	2.25	0.43
1:A:3405:PRO:HA	1:A:3406:ALA:HA	1.52	0.43
1:A:3670:MET:O	1:A:3674:SER:OG	2.35	0.43
1:A:4084:SER:OG	1:A:4087:HIS:N	2.49	0.43
1:A:334:HIS:O	1:A:337:LYS:HG2	2.18	0.43
1:A:726:LEU:O	1:A:730:LEU:HD23	2.17	0.43
1:A:759:GLY:HA3	1:A:799:TYR:OH	2.18	0.43
1:A:1238:GLN:OE1	1:A:1243:TYR:HB2	2.19	0.43
1:A:1395:LEU:HB3	1:A:1396:PRO:HD3	1.99	0.43
1:A:1866:GLN:OE1	1:A:1866:GLN:N	2.51	0.43
1:A:2220:MET:HA	1:A:2223:VAL:HG23	2.00	0.43
1:A:3601:VAL:HG23	1:A:3656:LEU:HD11	1.99	0.43
1:A:4065:LEU:HA	1:A:4074:PHE:HE1	1.83	0.43
1:A:1585:SER:OG	1:A:1588:ASP:OD1	2.34	0.43
1:A:2466:SER:C	1:A:2468:THR:H	2.25	0.43
1:A:3530:VAL:HG21	1:A:3568:ILE:HG13	1.99	0.43
1:A:667:TYR:O	1:A:671:SER:N	2.50	0.43
1:A:1805:PHE:O	1:A:1816:ARG:HD3	2.18	0.43
1:A:2447:LYS:HB2	1:A:2450:GLU:OE1	2.18	0.43
1:A:3548:GLY:O	1:A:3552:LYS:N	2.41	0.43
1:A:3611:GLU:H	1:A:3611:GLU:CD	2.27	0.43
1:A:1491:ILE:HG13	1:A:1492:ALA:H	1.84	0.43
1:A:1976:LEU:HD12	1:A:1976:LEU:HA	1.73	0.43
1:A:2085:MET:SD	1:A:2090:ARG:NH1	2.92	0.43
1:A:2474:TYR:HE2	1:A:2517:LEU:HD13	1.83	0.43
1:A:3325:ASP:HA	1:A:3328:ILE:HG22	2.00	0.43
1:A:3655:LYS:HD3	1:A:3658:ASP:OD2	2.18	0.43
1:A:4090:ARG:HH12	1:A:4110:GLN:HA	1.83	0.43
1:A:193:ALA:HB1	1:A:197:PHE:HE2	1.83	0.43
1:A:197:PHE:HA	1:A:200:PHE:HB3	1.99	0.43
1:A:714:VAL:HG11	1:A:732:PHE:HE2	1.84	0.43
1:A:753:GLN:NE2	1:A:791:ASP:O	2.34	0.43
1:A:880:MET:SD	1:A:883:TYR:HB2	2.58	0.43
1:A:2501:LEU:O	1:A:2505:VAL:HG23	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2508:GLN:NE2	1:A:2549:LYS:HG3	2.33	0.43
1:A:3499:ILE:HA	1:A:3502:MET:HE2	2.01	0.43
1:A:4020:MET:HG2	1:A:4027:TRP:NE1	2.33	0.43
1:A:143:LEU:O	1:A:144:MET:HE2	2.18	0.43
1:A:178:LEU:HD23	1:A:178:LEU:H	1.84	0.43
1:A:298:LEU:HD22	1:A:316:LEU:HD11	2.01	0.43
1:A:338:LEU:O	1:A:342:MET:HG2	2.19	0.43
1:A:468:LEU:HB3	1:A:478:CYS:SG	2.59	0.43
1:A:733:LEU:HD11	1:A:748:TYR:CE1	2.53	0.43
1:A:1260:LEU:O	1:A:1264:LEU:HD23	2.18	0.43
1:A:1852:LYS:HD2	1:A:1918:LEU:HD11	2.00	0.43
1:A:2298:GLU:HA	1:A:2301:GLN:OE1	2.19	0.43
1:A:3100:LYS:O	1:A:3103:ILE:HG22	2.18	0.43
1:A:3155:VAL:O	1:A:3158:LYS:HG2	2.18	0.43
1:A:3946:PHE:HE2	1:A:4005:PHE:HE2	1.65	0.43
1:A:736:LEU:HD23	1:A:736:LEU:HA	1.87	0.43
1:A:1910:GLU:N	1:A:1910:GLU:OE2	2.52	0.43
1:A:1977:ILE:HG12	1:A:1979:GLU:H	1.84	0.43
1:A:3386:SER:O	1:A:3389:VAL:HG12	2.18	0.43
1:A:3508:LYS:HA	1:A:3508:LYS:HD3	1.83	0.43
1:A:63:PHE:HA	1:A:66:LEU:HG	2.01	0.43
1:A:764:PRO:O	1:A:767:GLU:HG2	2.18	0.43
1:A:2352:HIS:CE1	1:A:2359:LYS:HB2	2.54	0.43
1:A:2356:MET:HG2	1:A:2358:ASP:H	1.83	0.43
1:A:2148:LYS:NZ	1:A:2185:MET:HE1	2.34	0.43
1:A:2296:SER:HA	1:A:2299:TYR:CD2	2.54	0.43
1:A:244:THR:HG23	1:A:285:CYS:SG	2.58	0.42
1:A:737:PRO:HD2	1:A:740:ILE:HD12	2.01	0.42
1:A:924:ARG:HA	1:A:924:ARG:HD2	1.80	0.42
1:A:999:LYS:HE2	1:A:999:LYS:HB2	1.83	0.42
1:A:1743:MET:O	1:A:1747:LEU:HD23	2.19	0.42
1:A:1851:LEU:HD21	1:A:1870:LYS:HA	2.01	0.42
1:A:2213:ASN:OD1	1:A:2214:ARG:N	2.51	0.42
1:A:2405:VAL:HG11	1:A:2441:LYS:HB2	2.01	0.42
1:A:3281:CYS:HA	1:A:3301:LEU:HD11	2.01	0.42
1:A:3332:THR:O	1:A:3335:ARG:HG2	2.19	0.42
1:A:425:ASP:OD1	1:A:426:THR:N	2.52	0.42
1:A:1250:LEU:O	1:A:1253:THR:HG22	2.19	0.42
1:A:2294:ILE:HG13	1:A:2295:GLN:H	1.85	0.42
1:A:3150:ASN:N	1:A:3150:ASN:OD1	2.53	0.42
1:A:111:CYS:HA	1:A:114:VAL:HG12	2.01	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1766:LEU:HB2	1:A:1778:PHE:CE2	2.55	0.42
1:A:2195:SER:O	1:A:5009:UNK:N	2.52	0.42
1:A:3575:LEU:HD23	1:A:3575:LEU:HA	1.90	0.42
1:A:54:GLN:O	1:A:58:VAL:HG13	2.19	0.42
1:A:911:LEU:HD23	1:A:911:LEU:HA	1.90	0.42
1:A:2411:LEU:C	1:A:2413:PHE:H	2.26	0.42
1:A:2482:ASP:OD1	1:A:2530:ARG:NH2	2.52	0.42
1:A:2788:SER:O	1:A:2792:THR:HG22	2.19	0.42
1:A:3359:ILE:O	1:A:3362:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:3507:ASP:HA	1:A:3542:PHE:CE1	2.54	0.42
1:A:3609:MET:HB2	1:A:3612:ARG:HH21	1.84	0.42
1:A:3916:TRP:CE2	1:A:4050:LYS:HE2	2.55	0.42
1:A:57:LEU:HD23	1:A:57:LEU:HA	1.92	0.42
1:A:195:ASN:HA	1:A:198:ARG:NE	2.34	0.42
1:A:376:ILE:HG23	1:A:377:ASN:N	2.34	0.42
1:A:1302:ALA:HA	1:A:1382:ILE:HG22	2.02	0.42
1:A:2793:PRO:O	1:A:2796:ALA:HB3	2.19	0.42
1:A:3531:TYR:CE1	1:A:3796:MET:HE1	2.54	0.42
1:A:3881:ASP:OD1	1:A:3881:ASP:N	2.52	0.42
1:A:4084:SER:HB3	1:A:4088:ASN:H	1.84	0.42
1:A:1797:LEU:O	1:A:1801:VAL:HG22	2.20	0.42
1:A:2891:ARG:O	1:A:2895:GLU:OE1	2.38	0.42
1:A:3183:ILE:HD13	1:A:3183:ILE:HA	1.85	0.42
1:A:3496:ILE:O	1:A:3499:ILE:HG12	2.20	0.42
1:A:3809:THR:HG22	1:A:3931:ALA:HA	2.00	0.42
1:A:83:GLU:HG2	1:A:87:LYS:NZ	2.35	0.42
1:A:132:ILE:HG22	1:A:173:LYS:NZ	2.35	0.42
1:A:236:LYS:HG3	1:A:243:GLN:HE21	1.85	0.42
1:A:1442:GLN:HA	1:A:1445:ARG:HD3	2.02	0.42
1:A:1557:GLU:HA	1:A:1592:MET:HE1	2.01	0.42
1:A:1793:THR:O	1:A:1797:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:2352:HIS:NE2	1:A:2359:LYS:HB2	2.35	0.42
1:A:3675:LYS:N	1:A:3676:PRO:HD3	2.34	0.42
1:A:54:GLN:HA	1:A:57:LEU:HB2	2.01	0.42
1:A:567:GLU:OE2	1:A:570:LYS:HD3	2.20	0.42
1:A:1206:LEU:HA	1:A:1209:LYS:HD3	2.01	0.42
1:A:185:HIS:O	1:A:188:GLU:HG2	2.19	0.42
1:A:586:GLN:HB2	1:A:613:HIS:HD2	1.84	0.42
1:A:2411:LEU:HA	1:A:2411:LEU:HD12	1.79	0.42
1:A:3085:GLU:H	1:A:3085:GLU:CD	2.27	0.42
1:A:3706:ASP:OD1	1:A:3706:ASP:N	2.48	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3883:LEU:HD12	1:A:3883:LEU:HA	1.94	0.42
1:A:3946:PHE:CE2	1:A:4005:PHE:HE2	2.38	0.42
1:A:1225:GLU:HG3	1:A:1236:LEU:HB2	2.01	0.42
1:A:1575:LEU:H	1:A:1575:LEU:HD23	1.85	0.42
1:A:1709:GLU:HA	1:A:1712:ARG:NE	2.35	0.42
1:A:2485:ARG:HA	1:A:2499:PHE:CE2	2.54	0.42
1:A:3176:MET:HE2	1:A:3176:MET:N	2.35	0.42
1:A:3694:PHE:O	1:A:3696:ARG:HD3	2.19	0.42
1:A:22:ALA:HB3	1:A:34:LEU:HD21	2.01	0.41
1:A:1392:MET:HA	1:A:1396:PRO:HD3	2.02	0.41
1:A:2085:MET:HA	1:A:2088:LEU:HB3	2.02	0.41
1:A:4025:GLY:HA2	1:A:4028:ILE:HD11	2.01	0.41
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:ARG:CZ	2.50	0.41
1:A:1261:LEU:HD11	1:A:1340:ARG:HG3	2.01	0.41
1:A:2210:VAL:O	1:A:2214:ARG:HG3	2.19	0.41
1:A:3681:LYS:O	1:A:3685:PRO:HD2	2.19	0.41
1:A:3839:TYR:HD1	1:A:3874:ARG:NH1	2.19	0.41
1:A:4054:ALA:O	1:A:4103:GLN:NE2	2.53	0.41
1:A:766:ALA:O	1:A:770:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:1783:ARG:HB3	1:A:1787:ARG:HH21	1.84	0.41
1:A:2247:ASP:OD1	1:A:2247:ASP:N	2.53	0.41
1:A:3413:TYR:HD1	1:A:3449:LYS:HD3	1.85	0.41
1:A:3455:LYS:NZ	1:A:3489:SER:O	2.54	0.41
1:A:3896:ALA:O	1:A:3900:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:470:ALA:HB1	1:A:553:VAL:HG11	2.01	0.41
1:A:1149:LYS:HE2	1:A:1149:LYS:HB2	1.89	0.41
1:A:1320:ASN:N	1:A:1320:ASN:OD1	2.53	0.41
1:A:1532:LEU:HD12	1:A:1532:LEU:HA	1.91	0.41
1:A:1930:GLU:H	1:A:1934:LEU:HD21	1.85	0.41
1:A:2380:ASN:O	1:A:2384:PHE:N	2.49	0.41
1:A:2492:ASP:H	1:A:2496:GLN:HE22	1.67	0.41
1:A:3360:LEU:O	1:A:3364:GLY:N	2.51	0.41
1:A:3671:ASN:OD1	1:A:3672:LYS:N	2.54	0.41
1:A:183:GLU:OE2	1:A:183:GLU:N	2.54	0.41
1:A:497:LEU:HA	1:A:498:PRO:HD3	1.93	0.41
1:A:2089:ASN:C	1:A:2091:HIS:H	2.29	0.41
1:A:2251:ILE:HD12	1:A:2251:ILE:H	1.85	0.41
1:A:2368:THR:HG21	1:A:2375:ALA:HB2	2.02	0.41
1:A:3051:LEU:O	1:A:3056:GLU:HB3	2.20	0.41
1:A:3320:ILE:HG13	1:A:3320:ILE:O	2.19	0.41
1:A:3450:MET:HE3	1:A:3450:MET:HA	2.03	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3462:ARG:HH22	1:A:3708:ARG:HG2	1.84	0.41
1:A:3575:LEU:HD23	1:A:3687:MET:HE1	2.01	0.41
1:A:670:LEU:O	1:A:673:THR:HB	2.21	0.41
1:A:2147:ALA:O	1:A:2151:ILE:HG12	2.21	0.41
1:A:2218:PHE:O	1:A:2222:HIS:ND1	2.51	0.41
1:A:2421:VAL:HG23	1:A:2457:PRO:HG3	2.02	0.41
1:A:2441:LYS:O	1:A:2444:PRO:HD2	2.21	0.41
1:A:3571:PHE:CD2	1:A:3699:LEU:HD21	2.55	0.41
1:A:539:GLN:O	1:A:541:MET:N	2.54	0.41
1:A:1231:GLN:O	1:A:1233:SER:N	2.53	0.41
1:A:1300:SER:HA	1:A:1304:HIS:HB2	2.02	0.41
1:A:2554:PHE:O	1:A:2555:LEU:HB2	2.21	0.41
1:A:3640:PHE:HA	1:A:3643:HIS:CE1	2.56	0.41
1:A:3779:SER:O	1:A:3782:SER:N	2.49	0.41
1:A:3881:ASP:HA	1:A:3966:GLN:HE22	1.86	0.41
1:A:762:TYR:HD2	1:A:765:LEU:HG	1.86	0.41
1:A:1022:ASP:OD1	1:A:1022:ASP:N	2.54	0.41
1:A:1445:ARG:HG2	1:A:1507:CYS:SG	2.61	0.41
1:A:1572:LEU:HD23	1:A:1572:LEU:HA	1.96	0.41
1:A:2289:ASP:HB3	1:A:2290:PRO:HD3	2.03	0.41
1:A:3107:ILE:HD13	1:A:3107:ILE:HA	1.92	0.41
1:A:3324:ARG:NH2	1:A:3325:ASP:OD1	2.44	0.41
1:A:3564:GLN:HG2	1:A:3565:GLY:N	2.36	0.41
1:A:3959:MET:SD	1:A:3959:MET:N	2.94	0.41
1:A:104:SER:O	1:A:107:ILE:HB	2.21	0.41
1:A:294:PHE:O	1:A:298:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:340:TYR:O	1:A:344:GLN:HG2	2.21	0.41
1:A:540:MET:SD	1:A:540:MET:N	2.94	0.41
1:A:800:LEU:O	1:A:852:ARG:NH2	2.53	0.41
1:A:1000:LYS:HA	1:A:1000:LYS:HD2	1.88	0.41
1:A:1071:ASN:OD1	1:A:1072:ALA:N	2.54	0.41
1:A:1358:LEU:HA	1:A:1411:TYR:OH	2.21	0.41
1:A:1906:THR:HG23	1:A:1908:GLY:H	1.86	0.41
1:A:1933:LEU:HD21	1:A:1936:ARG:HB3	2.03	0.41
1:A:2340:SER:HA	1:A:2343:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:2341:LEU:O	1:A:2345:VAL:HG12	2.21	0.41
1:A:2412:TYR:HA	1:A:2415:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:2443:MET:HE2	1:A:2444:PRO:HD3	2.03	0.41
1:A:257:ARG:HG3	1:A:260:ILE:HD12	2.02	0.41
1:A:789:TYR:CD1	1:A:792:ILE:HD11	2.56	0.41
1:A:894:PHE:HB3	1:A:905:ILE:HG23	2.03	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:899:ARG:HG2	1:A:2569:SER:HA	2.03	0.41
1:A:1388:ASP:H	1:A:1391:VAL:HG22	1.86	0.41
1:A:1422:LYS:HD3	1:A:1422:LYS:HA	1.81	0.41
1:A:1838:GLU:O	1:A:1842:THR:OG1	2.25	0.41
1:A:2409:THR:OG1	1:A:2410:GLU:N	2.54	0.41
1:A:2517:LEU:HD23	1:A:2517:LEU:HA	1.85	0.41
1:A:2773:ARG:NH2	1:A:2785:ILE:HD11	2.36	0.41
1:A:300:TRP:CZ3	1:A:308:LEU:HD21	2.56	0.40
1:A:1691:GLN:O	1:A:1694:THR:HG22	2.20	0.40
1:A:2461:PHE:C	1:A:2473:MET:HE1	2.45	0.40
1:A:2522:ARG:HG2	1:A:2561:PHE:HE1	1.86	0.40
1:A:2917:PRO:HB2	1:A:2919:ASP:OD1	2.21	0.40
1:A:3605:ASN:O	1:A:3608:LYS:HG3	2.21	0.40
1:A:1378:GLU:OE2	1:A:1380:ALA:HB3	2.21	0.40
1:A:1935:GLU:HG2	1:A:1936:ARG:N	2.36	0.40
1:A:3114:TYR:OH	1:A:3125:ARG:NH2	2.55	0.40
1:A:353:ASP:N	1:A:353:ASP:OD1	2.53	0.40
1:A:718:MET:HE2	1:A:751:ALA:HA	2.04	0.40
1:A:770:LEU:HD11	1:A:855:VAL:HG22	2.03	0.40
1:A:789:TYR:HD1	1:A:792:ILE:HD11	1.86	0.40
1:A:872:THR:O	1:A:872:THR:HG22	2.22	0.40
1:A:1667:SER:O	1:A:1670:GLU:HG2	2.22	0.40
1:A:1916:ILE:HD13	1:A:1916:ILE:HA	1.93	0.40
1:A:2572:TYR:CE2	1:A:2788:SER:HB2	2.56	0.40
1:A:3838:GLU:OE1	1:A:3874:ARG:NH1	2.54	0.40
1:A:491:CYS:SG	1:A:626:LEU:HB2	2.61	0.40
1:A:1247:PRO:HB2	1:A:1250:LEU:HB2	2.02	0.40
1:A:1362:ASP:N	1:A:1362:ASP:OD1	2.53	0.40
1:A:1914:THR:O	1:A:1918:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:2943:PHE:CE1	1:A:2947:ILE:HD12	2.56	0.40
1:A:3355:LYS:HG3	1:A:3358:ARG:HH22	1.86	0.40
1:A:3582:GLU:HG2	1:A:3583:LEU:HD22	2.03	0.40
1:A:995:PHE:HB3	1:A:1005:ASP:OD1	2.22	0.40
1:A:1292:LYS:H	1:A:1292:LYS:HG2	1.70	0.40
1:A:1356:TRP:O	1:A:1360:LYS:NZ	2.54	0.40
1:A:1541:ALA:HA	1:A:1550:VAL:HG12	2.02	0.40
1:A:2270:ASN:O	1:A:2274:ILE:HG12	2.22	0.40
1:A:2786:LYS:O	1:A:2787:HIS:C	2.64	0.40
1:A:2869:LEU:HD23	1:A:2869:LEU:HA	1.89	0.40
1:A:3062:LEU:HG	1:A:3089:LEU:HD11	2.04	0.40
1:A:3314:SER:C	1:A:3316:LEU:H	2.30	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3465:PHE:O	1:A:3468:LEU:HB2	2.22	0.40
1:A:3493:TRP:NE1	1:A:3711:PRO:HG3	2.37	0.40
1:A:3913:ILE:HD12	1:A:3913:ILE:HA	1.86	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	3640/4156 (88%)	3354 (92%)	284 (8%)	2 (0%)	48 81

All (2) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3480	LEU
1	A	2787	HIS

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	3203/3671 (87%)	3201 (100%)	2 (0%)	88 89

All (2) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2283	ASN
1	A	3478	GLU

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (35) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	74	ASN
1	A	250	ASN
1	A	334	HIS
1	A	344	GLN
1	A	356	ASN
1	A	409	GLN
1	A	485	GLN
1	A	554	ASN
1	A	656	GLN
1	A	720	GLN
1	A	947	GLN
1	A	1367	HIS
1	A	1374	GLN
1	A	1426	GLN
1	A	1457	GLN
1	A	1471	GLN
1	A	1611	GLN
1	A	1613	HIS
1	A	1687	HIS
1	A	1946	ASN
1	A	2141	ASN
1	A	2845	ASN
1	A	3004	HIS
1	A	3084	GLN
1	A	3104	GLN
1	A	3122	HIS
1	A	3123	GLN
1	A	3130	GLN
1	A	3162	ASN
1	A	3177	ASN
1	A	3251	ASN
1	A	3440	GLN
1	A	3850	HIS
1	A	3969	ASN
1	A	4092	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	2

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	4128:MET	C	5009:UNK	N	93.18
1	A	5016:UNK	C	6001:UNK	N	48.96

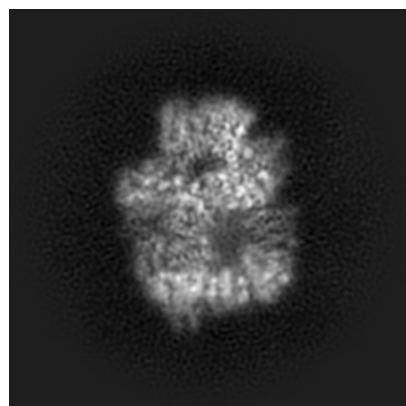
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-11211. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

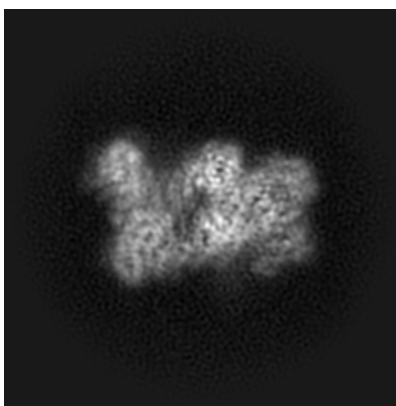
Images derived from a raw map, generated by summing the deposited half-maps, are presented below the corresponding image components of the primary map to allow further visual inspection and comparison with those of the primary map.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

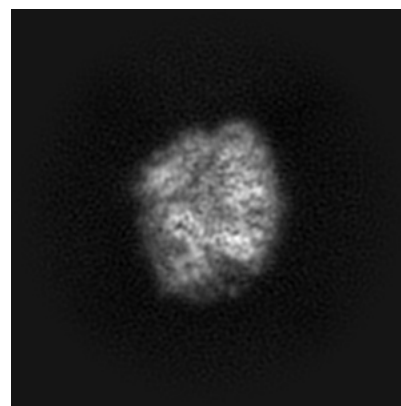
6.1.1 Primary map



X

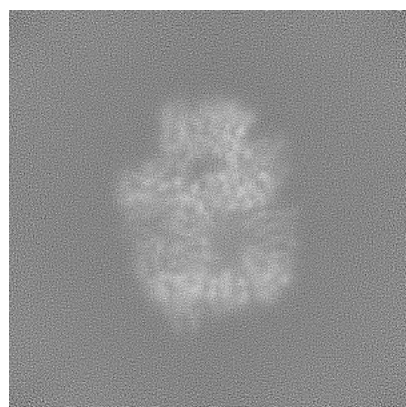


Y

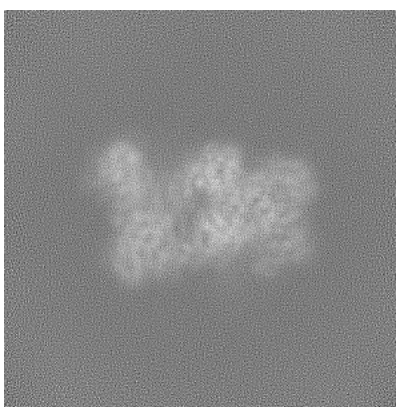


Z

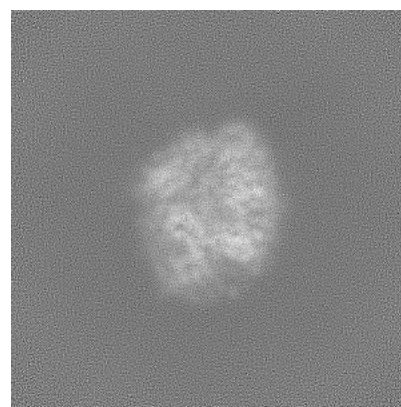
6.1.2 Raw map



X



Y

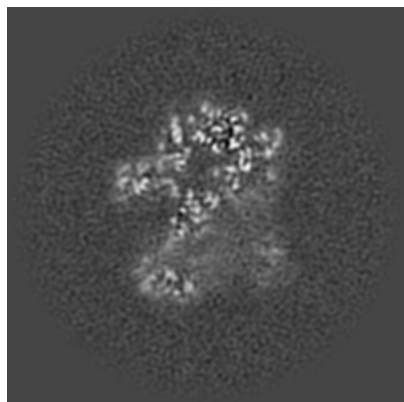


Z

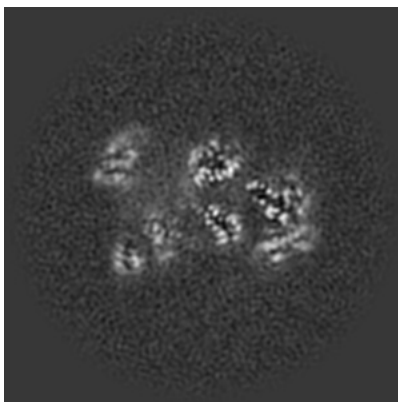
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

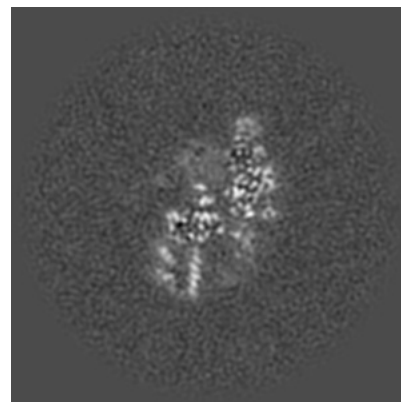
6.2.1 Primary map



X Index: 215

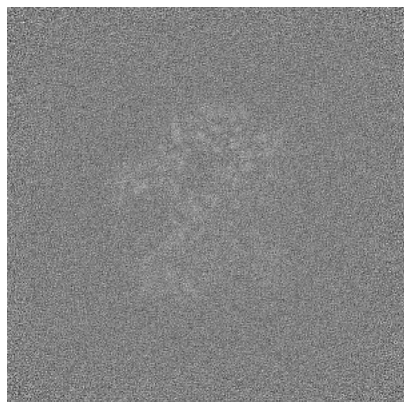


Y Index: 215

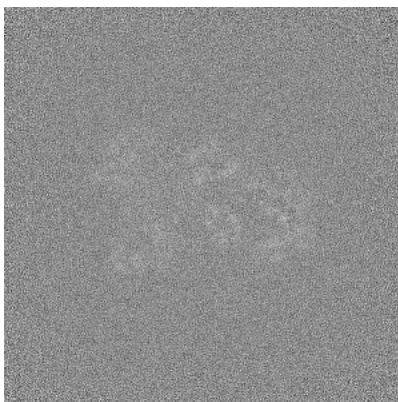


Z Index: 215

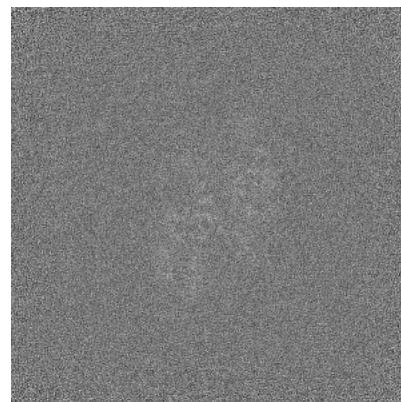
6.2.2 Raw map



X Index: 215



Y Index: 215

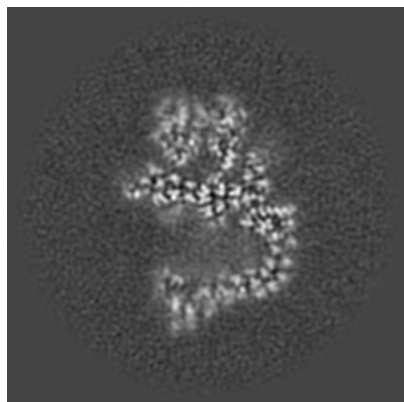


Z Index: 215

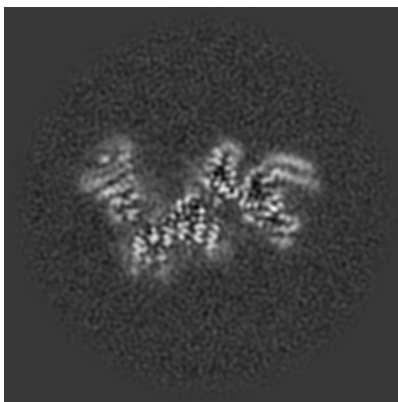
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

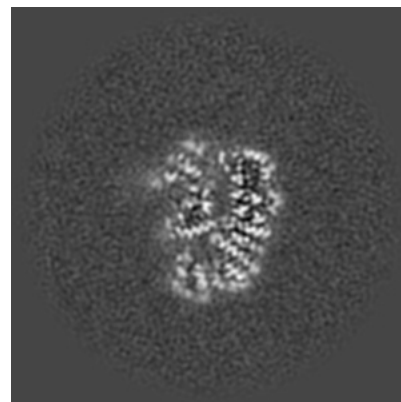
6.3.1 Primary map



X Index: 246

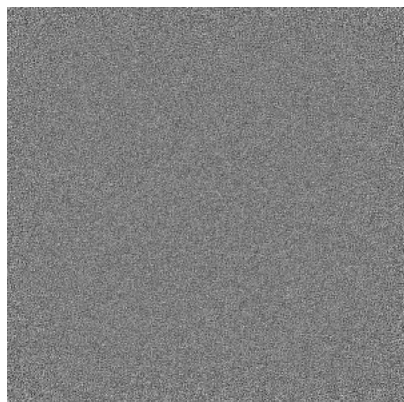


Y Index: 185

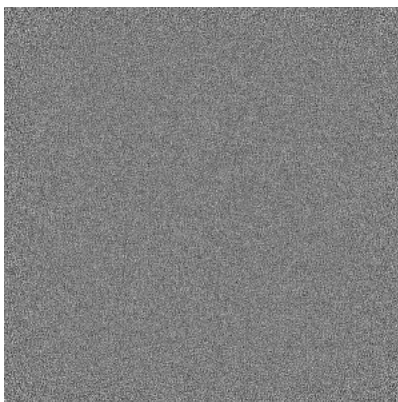


Z Index: 228

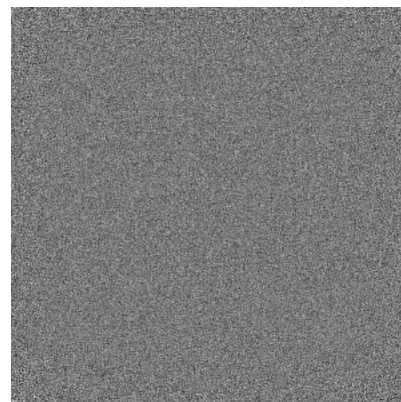
6.3.2 Raw map



X Index: 0



Y Index: 0

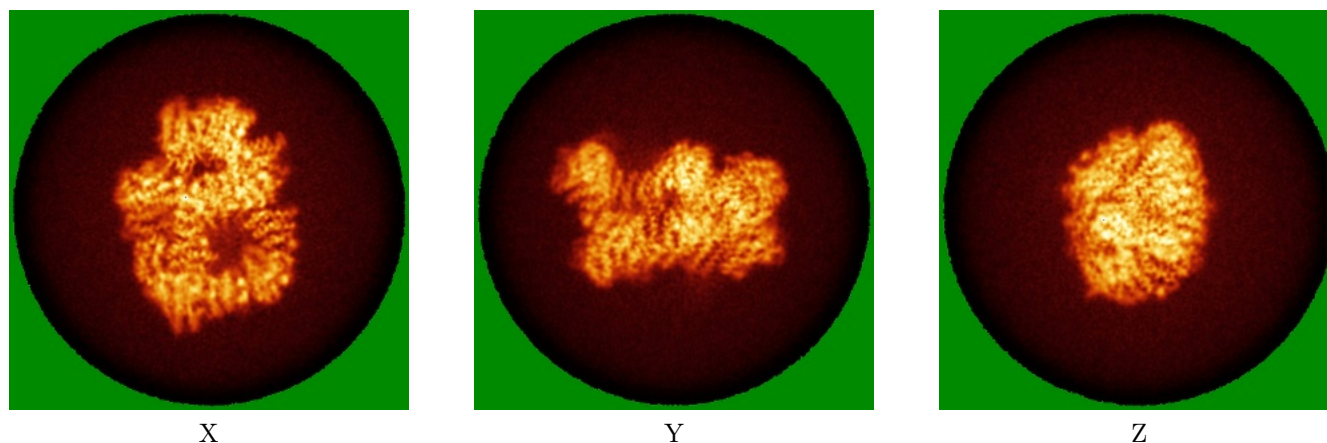


Z Index: 0

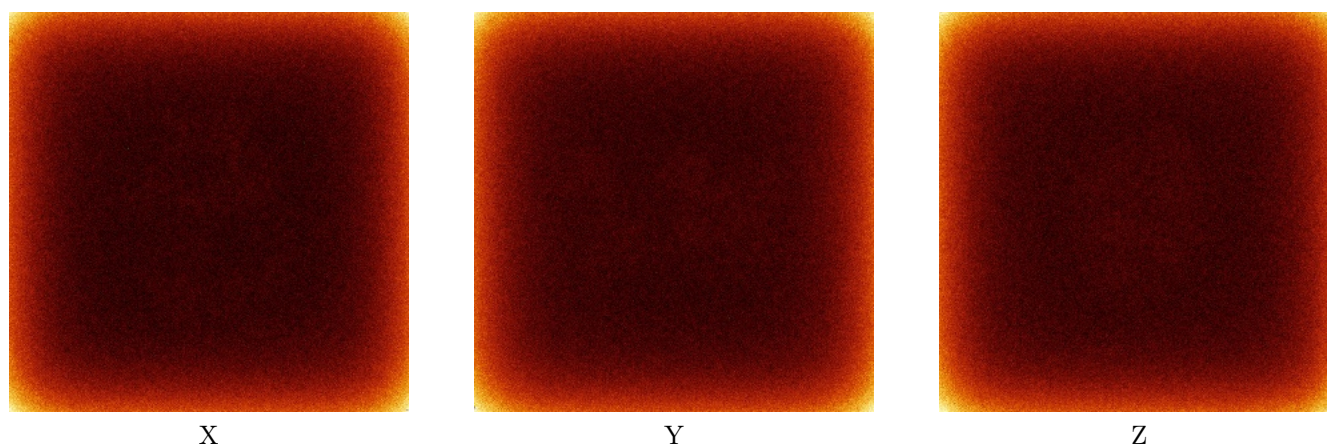
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

6.4 Orthogonal standard-deviation projections (False-color) [i](#)

6.4.1 Primary map



6.4.2 Raw map



The images above show the map standard deviation projections with false color in three orthogonal directions. Minimum values are shown in green, max in blue, and dark to light orange shades represent small to large values respectively.

6.5 Orthogonal surface views [i](#)

This section was not generated.

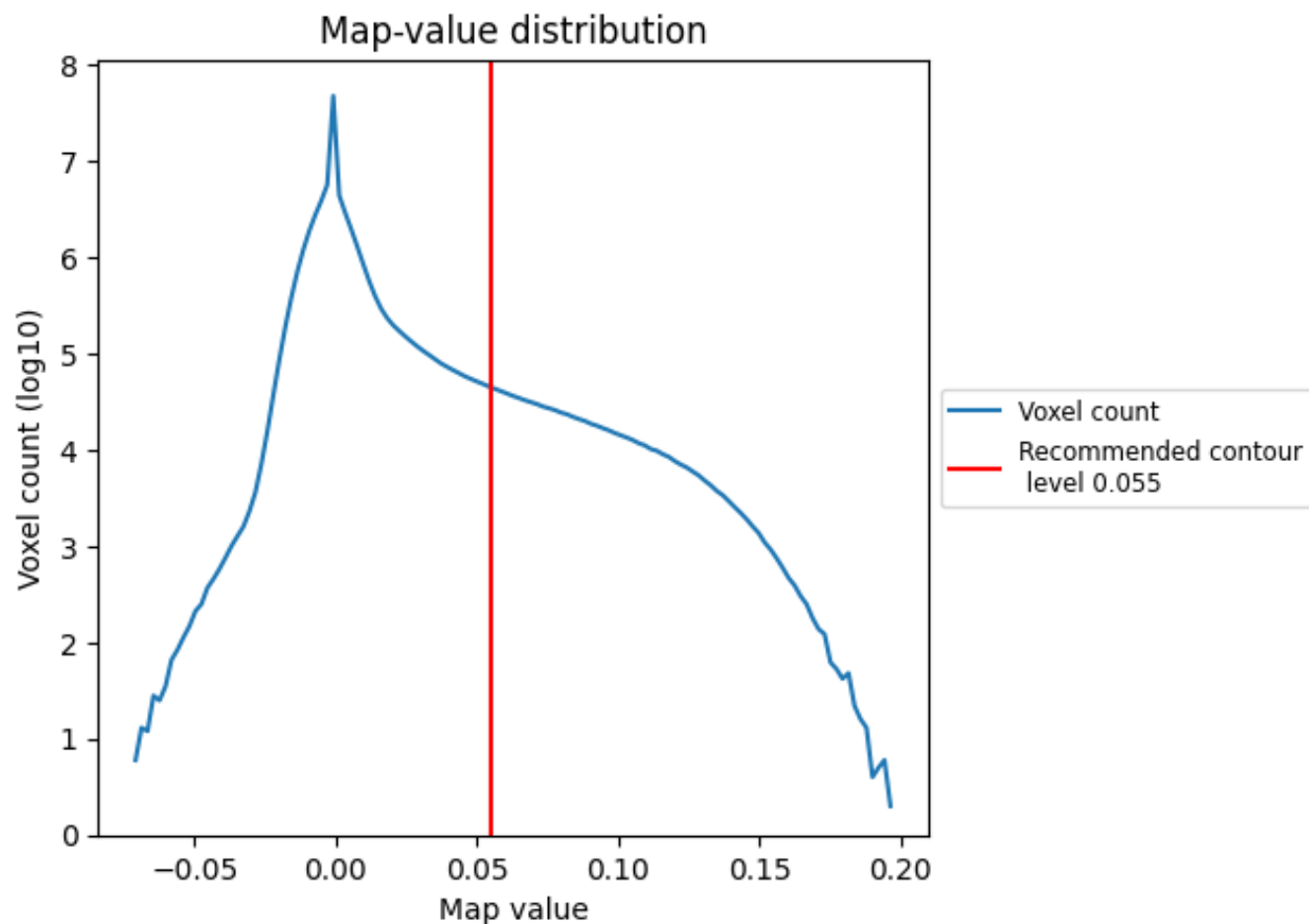
6.6 Mask visualisation [i](#)

This section was not generated. No masks/segmentation were deposited.

7 Map analysis [i](#)

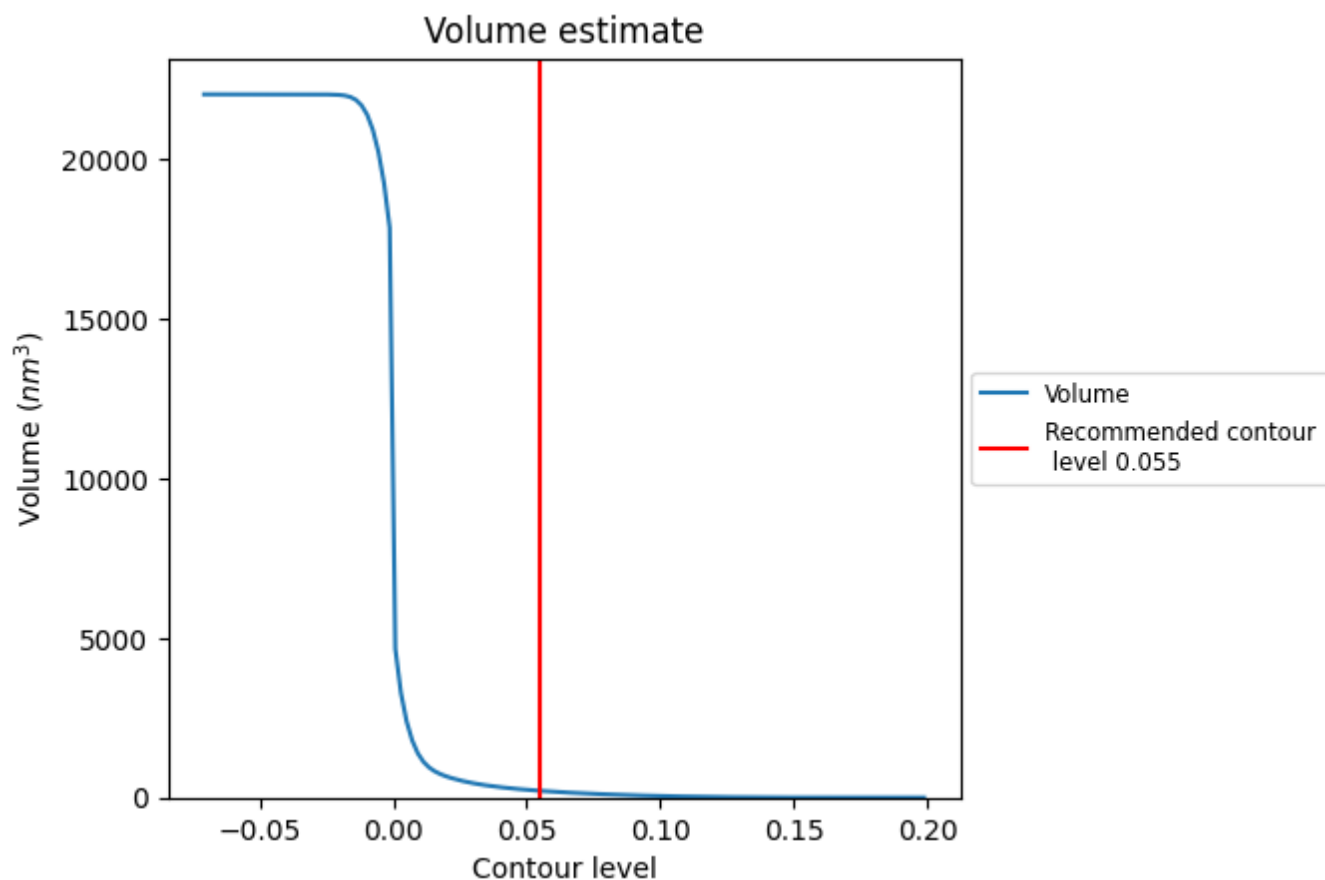
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



The map-value distribution is plotted in 128 intervals along the x-axis. The y-axis is logarithmic. A spike in this graph at zero usually indicates that the volume has been masked.

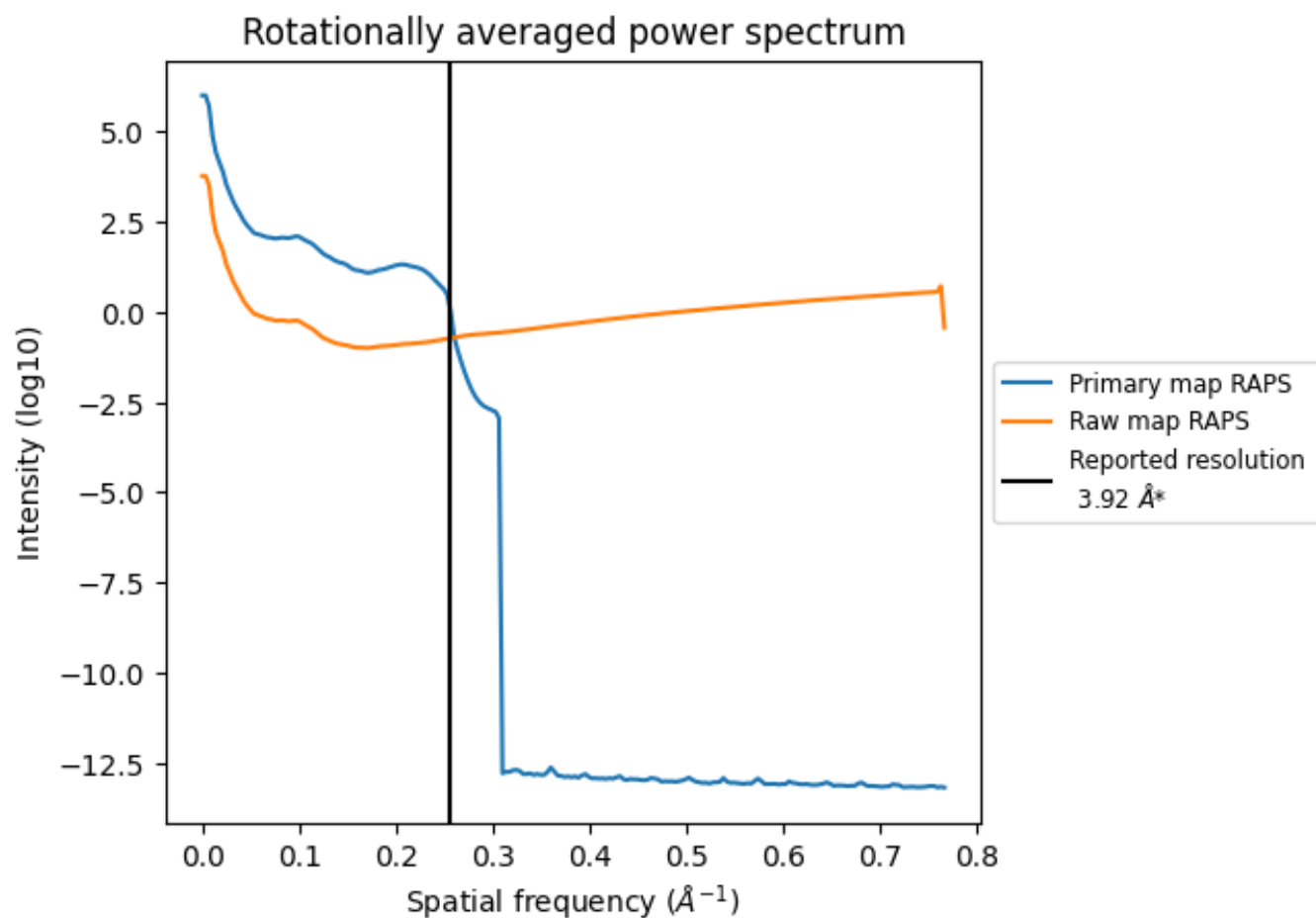
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 212 nm³; this corresponds to an approximate mass of 191 kDa.

The volume estimate graph shows how the enclosed volume varies with the contour level. The recommended contour level is shown as a vertical line and the intersection between the line and the curve gives the volume of the enclosed surface at the given level.

7.3 Rotationally averaged power spectrum ⓘ

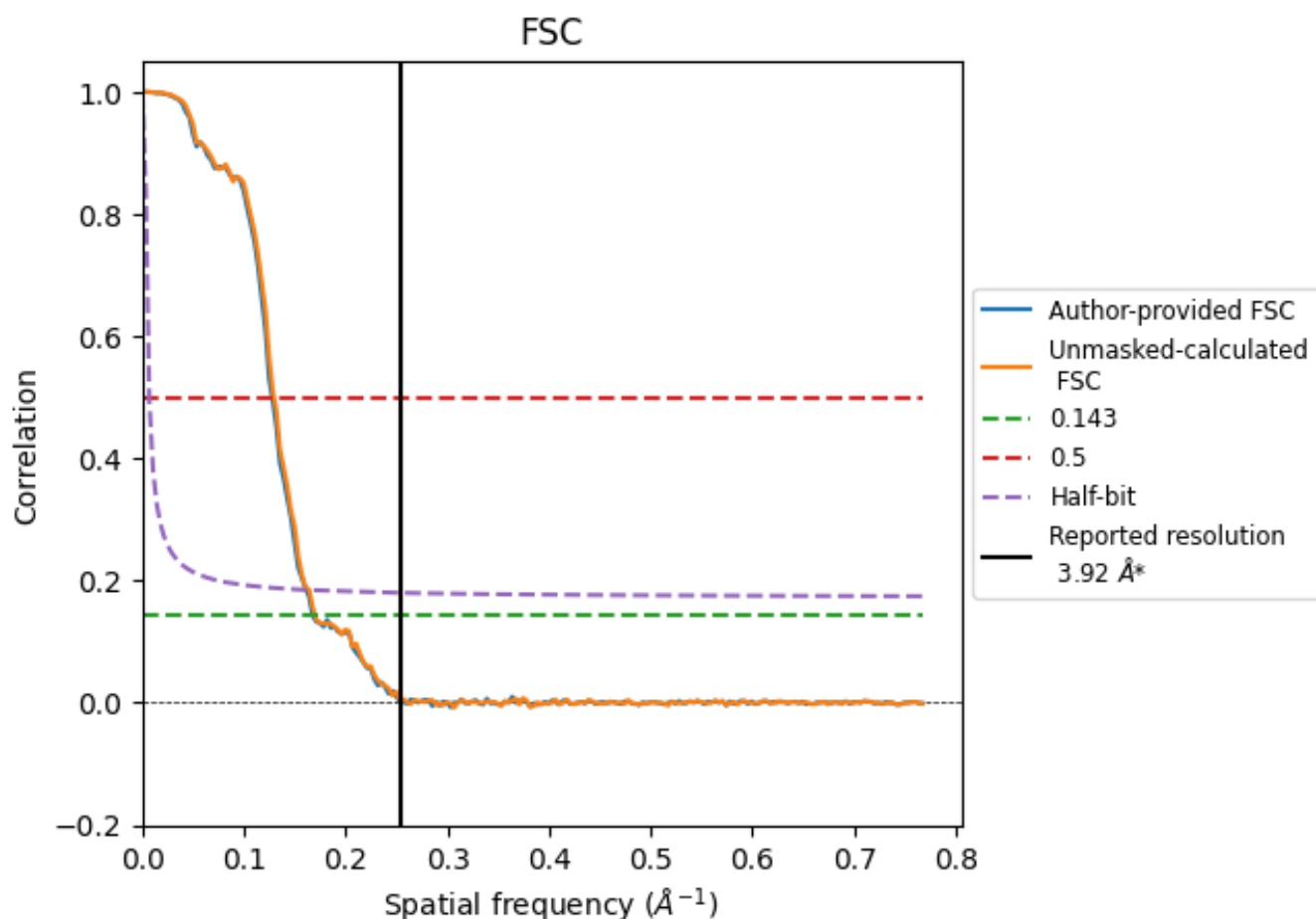


*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.255 Å⁻¹

8 Fourier-Shell correlation [i](#)

Fourier-Shell Correlation (FSC) is the most commonly used method to estimate the resolution of single-particle and subtomogram-averaged maps. The shape of the curve depends on the imposed symmetry, mask and whether or not the two 3D reconstructions used were processed from a common reference. The reported resolution is shown as a black line. A curve is displayed for the half-bit criterion in addition to lines showing the 0.143 gold standard cut-off and 0.5 cut-off.

8.1 FSC [i](#)



*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.255 Å⁻¹

8.2 Resolution estimates [i](#)

Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	3.92	-	-
Author-provided FSC curve	5.97	7.82	6.20
Unmasked-calculated*	5.88	7.72	6.09

*Resolution estimate based on FSC curve calculated by comparison of deposited half-maps. The value from author-provided FSC intersecting FSC 0.143 CUT-OFF 5.97 differs from the reported value 3.92 by more than 10 %

The value from deposited half-maps intersecting FSC 0.143 CUT-OFF 5.88 differs from the reported value 3.92 by more than 10 %

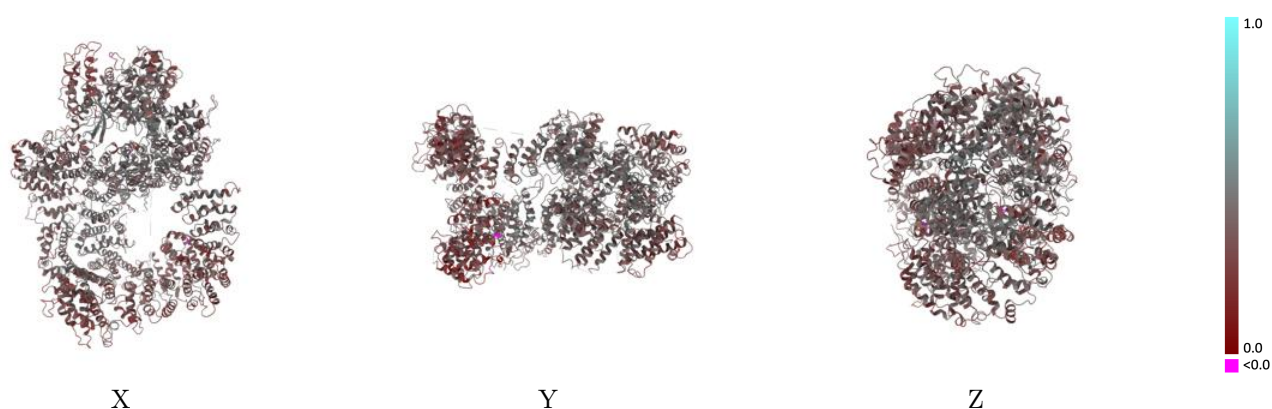
9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-11211 and PDB model 6ZH2. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 4.

9.1 Map-model overlay [i](#)

This section was not generated.

9.2 Q-score mapped to coordinate model [i](#)

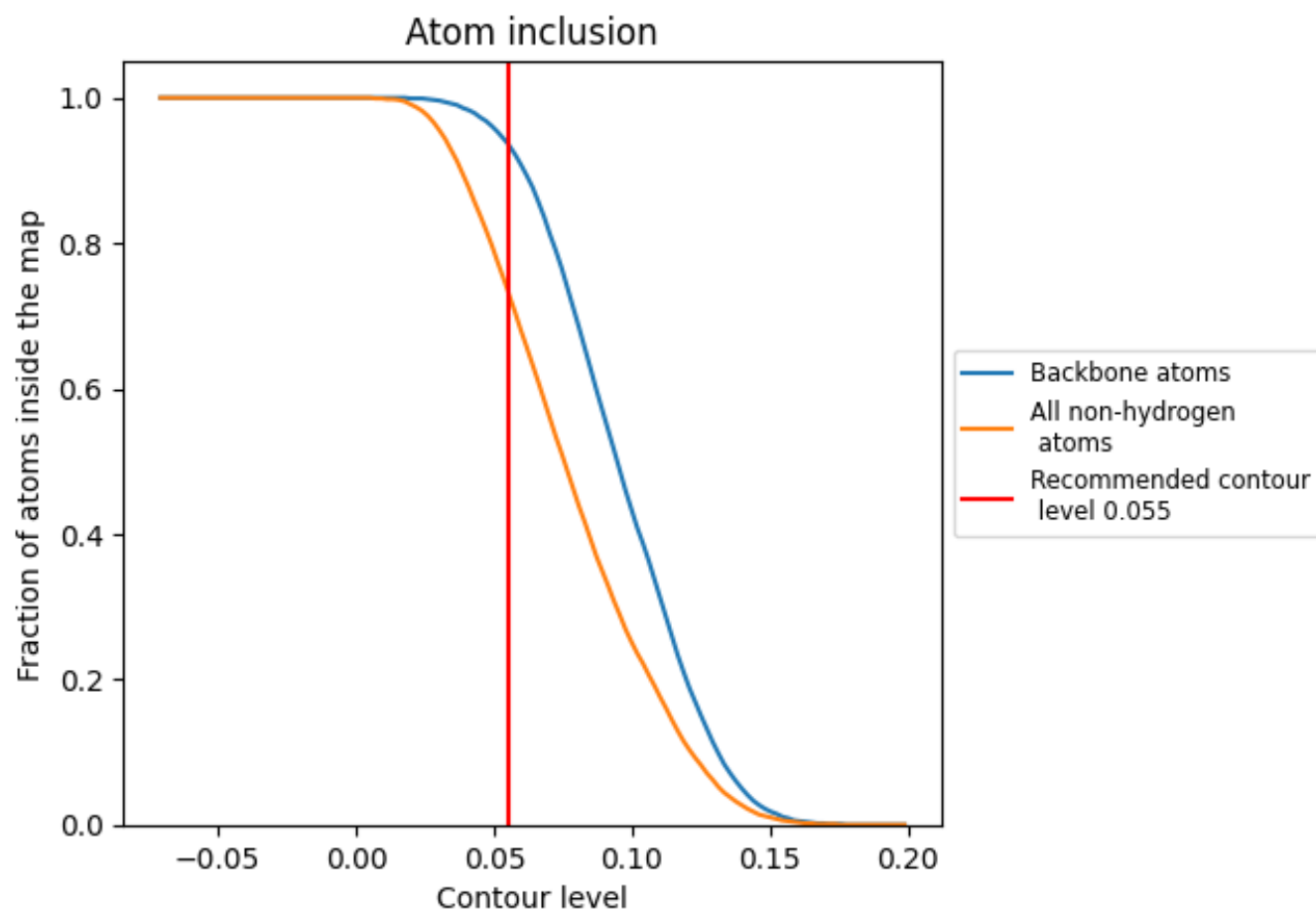


The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions at which atoms can be resolved. Low Q-score values may therefore be expected for many entries.

9.3 Atom inclusion mapped to coordinate model [i](#)

This section was not generated.

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 94% of all backbone atoms, 74% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

9.5 Map-model fit summary ⓘ

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (0.055) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	0.7350	0.3790
A	0.7350	0.3790

